



## 공 학 석 사 학 위 논 문

## SCR 시스템의 믹서 형상에 따른 요소 수용액의 유동 혼합 해석

2016년 6월

부경대학교대학원

제어기계공학과

전 혜 진

## 공 학 석 사 학 위 논 문

# SCR 시스템의 믹서 형상에 따른 요소 수용액의 유동 혼합 해석

지도교수 고 대 권

이 논문을 공학석사 학위논문으로 제출함.

## 2016년 6월

부경대학교대학원

제어기계공학과

## 전 혜 진

## 전혜진의 공학석사 학위논문을 인준함.

2016년 6월 20일

주 심 공학박사 한규일 위 원 정석호 공학박사 위 원 공학박사 고대권

목 차

Abstract ·····	iii
기호 설명	iv
1. 서 론	1
1.1 연구 배경	1
1.2 연구 목적	3
2. 이론 해석	5
2.1 디젤기관의 NOx 생성 및 저감	5
2.1.1 NOx의 생성 ·····	5
2.1.2 NOx의 저감 기술	8
2.2 Urea-SCR 시스템	10
2.2.1 화학 반응식	10
2.2.2 SCR 촉매 ······	12
2.3 지배 방정식	14
2.3.1 난류 모델	14
2.3.2 분사 모델	16
2.3.3 증발 모델	17
2.3.4 벽막 모델	19

3. 수치해석	23
3.1 수치해석 기법	23
3.2 CFD 모델링	24
3.3 수치해석 조건	25
3.3.1 믹서 형상	25
3.3.2 요소 수용액 분사 각도	27
3.3.3 배기가스 온도에 따른 NH₃의 변환율	28
3.3.4 배기가스 속도에 따른 NH₃의 변환율	28
3.4 수치해석 신뢰성 검증	29
4. 결과 및 고찰	33
4.1 믹서 형상에 따른 결과	33
4.2 요소 수용액 분사 각도에 따른 결과	44
4.3 배기가스 온도에 따른 NH₃의 변환율의 해석 결과 …	46
4.4 배기가스 속도에 따른 NH₃의 변환율의 해석 결과 …	49
5. 결 론	51
참고 문헌	53

#### Numerical Analysis of Flow Mixing of Urea-Water-Solution According to Mixer Configuration in SCR Systems

#### Hye Jin Jun

## Department of Control and Mechanical Engineering, The Graduate School, Pukyong National University

Recently the SCR system is spotlighted due to reduction policy of the NOx. The NOx is ingredient in the formation of smog and acid rain. Urea-SCR system is known as the most efficient method to resolve the problem of NOx emission.

The process of urea water solution (UWS) evaporation and mixing is important in SCR system. Optimizing the injection of UWS is influenced by multiple factors such as gas temperature, injector angle and mixer configuration. Especially effects of mixer configuration on flow mixing of UWS in SCR system are important. Therefore, it is necessary to analyze the flow mixing characteristic using computational fluid dynamics (CFD) tool. The flow mixing characteristics for UWS was analyzed according to mixer configuration in a straight SCR duct using ANSYS FLUENT tool.

In this paper it was compared the effect of mixer configuration, injection angle and gas temperature on the flow mixing characteristics of UWS such as conversion ratio and uniformity of NH<sub>3</sub> in a SCR system. As a result in case of vane type mixer the NH<sub>3</sub> conversion ratio and uniformity increased 27.86% and 97.22% respectively.

## 기호 설명

$A_p$	droplet surface area $[m^2]$
$B_{m,i}$	Spalding mass number for species $i$ [-]
$C_{1arepsilon}, C_{2arepsilon}, C_{3arepsilon}$	constant [-]
$C_{\!i,s}$	vapor concentration at the droplet surface $[\rm kmol/m^3]$
$C_{i,\infty}$	vapor concentration in the bulk gas [kmol/m <sup>3</sup> ]
$d_p$	particle diameter [m²]
$\overrightarrow{F}$	additional acceleration term [-]
k	turbulence kinetic energy [J/kg]
$k_c$	mass transfer coefficient [m/s]
$k_{c,i}$	mass transfer coefficient of component $i$ [m/s]
$M_{w,i}$	molecular weight of species $i \ [kmol/kg]$
$m_i$	mass of component $i$ in droplet [kg]
$m_p$	droplet mass [kg]
$N_i$	molar flux of vapor $[kmol/m^2 \cdot s]$
Р	local absolute pressure [Pa]
$P_{sat}$	saturated vapor pressure [Pa]
R	universal gas constant [kPa • m³/kg • k]

reynolds number [–]
boiling point [K]
particle droplet temperature [K]
vaporization temperature [K]
local bulk temperature [K]
fluid phase velocity [m/s]
particle velocity [m/s]
local bulk mole fraction of specise $i$ [-]
vapor mass fraction at the surface [-]
vapor mass fraction in the bulk gas [-]
uniformity [–]
field variable [-]
average value [-]
fluid density [kg/m <sup>3</sup> ]
density of the particle $[kg/m^3]$
density of bulk gas $[kg/m^3]$
molecular viscosity of the fluid $[\rm kg/m  \cdot  s]$
dissipation rate [-]
turbulent Prandtl numbers [-]

#### 1. 서 론

#### 1.1 연구 배경

디젤엔진의 배출가스 중 질소산화물(nitrogen oxide, NOx)은 고온 연소 에서 공기 중의 질소가 산화되어 발생한다. 연소에 의하여 발생하는 것은 주로 일산화질소(nitrogen monoxide, NO)인데, 이는 대기 중에서 산화되어 이산화질소(nitrogen dioxide, NO<sub>2</sub>)가 된다. 이산화질소는 인체에 유해하며 호흡기 질환의 원인이 되기도 한다. 또한 NOx는 물(water, H<sub>2</sub>O)과 반응하 여 질산(nitric acid, HNO<sub>3</sub>)을 만들고 이는 산성비의 주요 원인이 된다. NOx는 성층권에서 오존을 파괴하며 대기 오염에 크게 영향을 미친다.

2016년 1월 1일부터 배출규제해역(Emission Control Area, ECA)에서 NOx 규제를 위한 TierⅢ가 시행되었다. Fig 1-1에서 Tier I,Ⅱ,Ⅲ의 NOx 규제와 적용 선박에 대해 설명하고 있으며, TierⅢ는 Tier I을 기준으로 약 80%의 질소산화물 배출량을 저감하도록 규정하였고, 이에 대응하기 위 하여 후처리 시스템에 대한 연구가 활발히 이루어지고 있다.



Fig. 1-1 Explain the Tier  $I, \Pi, \Pi$  for NOx regulations.

현재 개발 중인 촉매에 의한 DeNOx 후처리 시스템에는 암모니아-선택 적 환원 촉매장치(NH<sub>3</sub>-selective catalytic reduction, NH<sub>3</sub>-SCR) 시스템과 요소-SCR(urea-SCR) 시스템이 있다. NH<sub>3</sub>-SCR 시스템은 기체 상태인 암 모니아(ammonia, NH<sub>3</sub>)를 직접 사용하는 방식인데, NOx의 정화효율이 최 소 70% 이상 가능하나, NH<sub>3</sub>의 이동 및 보관, 인체에 미치는 영향 등의 단 점이 있어 사용하기에 제약이 많다. 이러한 NH<sub>3</sub>-SCR 시스템의 단점을 보 완한 것이 Urea-SCR 시스템이다. 이 시스템에서 요소 수용액(Urea Water Solution, UWS)이 사용되며, 요소 수용액은 고체인 요소와 액체인 H<sub>2</sub>O을 혼합하여 인젝터(injector)로 분사된다. SCR 시스템의 촉매부 전단에서 NH<sub>3</sub>가 아주 짧은 시간 100% 변화 되어야 하며 이를 위해서 요소 수용액

#### 1.2 연구 목적

디젤엔진을 사용하기 위해서는 배기가스 규제 대상인 NOx 및 입자상 물질(particulate matter, PM) 배출량의 감소가 요구되며, 따라서 이를 감소 시키는 후처리 장치가 설치되어야 한다. 특히 NOx를 저감시키는 SCR 시 스템은 여전히 기술적 연구가 요구된다. SCR 시스템은 선택적 촉매 환원 법으로써 가장 유망한 NOx 저감 장치로 주목받고 이미 적용되고 있다.

SCR 촉매부 전단에서 발생하는 주요 반응으로는 요소 수용액이 액적 미 립화 상태에서 고온의 배기가스와 혼합되면서 액상의 H<sub>2</sub>O가 기화되는 가수 분해 반응을 통해 요소가 수증기로 분리된다. 이후 남아있는 순수 요소는 열분해반응으로 NH<sub>3</sub>와 이소시안산(isocyanic acid, HNCO)으로 분리되며, HNCO는 배기가스에 포함된 수증기와 다시 반응하여 NH<sub>3</sub>가 된다.

SCR 시스템의 환원제인 NH<sub>3</sub>는 인젝터를 통해 배기관으로 분무된 요소 수 용액의 가수분해 및 열분해반응으로 생성되기 때문에 충분한 변환이 요구 된다. 따라서 NH<sub>3</sub>의 변환율은 SCR 시스템의 설계에 있어서 효율에 영향 을 주는 주요한 인자이다. 또한, NH<sub>3</sub>가 SCR 촉매부 전단에 고르게 분포하 면 SCR 촉매의 전체 표면적을 효율적으로 사용할 수 있기 때문에 효율이 향상되어 요소의 낭비를 줄일 수 있으며, 특히 NH<sub>3</sub>가 반응하지 못하여 나 타나는 암모니아 슬립을 방지할 수 있다. 따라서 SCR 촉매부 전단에서의 NH<sub>3</sub>의 농도 분포 또한 주요한 인자이다.

실험 장치 및 실험 요건 등의 문제로 인해, 배기관에서 인젝터를 통해 분 무되는 요소 수용액의 유동현상, 난류, 열전달 및 화학 반응에 대한 수치적 모델의 적용이 용이한 전산유체역학(computational fluid dynamics, CFD) 등의 상용소프트웨어가 최근에 널리 사용되고 있다. 이를 통해 요소 수용 액의 다양한 분무 각도 및 분무 온도 등의 분무 조건에 따른 혼합특성을

- 3 -

유추하고 농도 분포를 면밀하게 분석할 수 있으며, 데이터 확보를 위한 시 간과 비용을 최소화할 수 있다.

따라서 본 연구에서는 ANSYS FLUENT R15.0을 이용하여 계산된 값을 실험 결과<sup>3)</sup>와 비교하여 검증하였고, 검증을 거친 후, SCR 시스템의 믹서 설치, 요소 수용액의 분사 각도, 배기가스 온도에 따른 요소 수용액의 증발 및 유동 혼합에 대해 알아보고자 한다.



#### 2. 이론 해석

#### 2.1 디젤 기관의 NOx 생성 및 저감

#### 2.1.1 NOx의 생성

NOx는 질소의 종류 및 산화 과정에서 화학반응에 따라 열적(thermal) NOx, 프롬프트(prompt) NOx 및 연료(fuel) NOx의 3가지로 분류할 수 있 다. 일반적인 연소 장치에서는 thermal NOx가 NOx의 대부분을 차지하지 만, 유기 질소 화합물을 함유한 중유나 석탄의 연소과정에서는 fuel NOx가 중요한 NOx의 생성원이다.

Prompt NOx나 fuel NOx는 주로 연소 영역이나 가스 반응영역으로부터 조금 떨어진 하류에서 생성됨에 반해 thermal NOx는 산소의 농도, 화염온 도 및 체류시간이 적당하기만 하면 고온영역에서 어디에서나 발생한다. 또 한 고온의 화염 후류에서 연료가 희박한 연소 상태에서 많이 발생한다<sup>4)</sup>.

#### 1) Thermal NOx

연소용 공기 중에 함유 되어있는 N<sub>2</sub>가 고온에서 산화되어 발생되는 질 소 산화물로 NOx의 생성 속도는 온도에 매우 민감하며, Fig. 2-1과 같이 1300℃ 이상에서 발생되며 온도가 증가할수록 생성 속도는 급격히 증가한 다. NO 생성의 주된 반응은 식 (2.1)~(2.3)으로 주어지며, 일반적으로 연료 와 공기의 혼합물이 이론적 공연비 부근 또는 연료의 희박 연소 상태에 적 용된다.

$$O + N_2 \rightarrow NO + N \tag{2.1}$$

 $N + O_2 \rightarrow NO + O \tag{2.2}$ 

 $N + OH \rightarrow NO + H \tag{2.3}$ 

충분한 산소와 질소가 존재하고, 연료가 연소할 때 발생되는 열에 의하 여 기체의 온도가 상승하면서 NO의 생성량도 점차 증가하게 된다. 연료의 연소에 있어서 양론적 이론공기량에서 연소가 단열적으로 이루어졌을 때 기체의 온도는 가장 높아진다. 주어진 연료의 양에 대하여 공기의 양을 변 화시키면서 기체의 온도를 조절할 경우, 공기의 양이 이론공기량에 비하여 매우 많을 때(fuel lean condition)는 온도가 단열화염온도(adiabatic fuel temperature)보다 매우 낮으므로 NO의 생성량은 많지 않다. 공기의 양이 이론공기량에 비하여 매우 적을 때에도 온도가 역시 단열화염온도보다 낮 게 되고 질소를 산화하는데 필요한 산소의 농도가 낮기 때문에 생성되는 NO의 양이 적게 된다. NO의 생성이 가장 많게 되는 조건은 이론공기량보 다 약간 많은 공기가 주입되었을 때가 된다.

이러한 원리가 기체연료의 연소에서 공기량을 과량으로 공급하여 화염온 도를 낮춤으로서 NOx의 발생을 제어하는 기본이 된다. 기체연료의 연소에 서 발생하는 NOx의 대부분은 thermal NOx가 차지하고 있으며, thermal NOx증가는 화염온도의 증가와 보일러에서 이용할 수 있는 산소농도에 영 향을 받는다.

#### 2) Prompt NOx

연료가 연소용 공기와 완전 혼합되기 전 고농도 상태로 1000℃ 이상의 고온 영역에 노출 되었을 때 급격히 생성되는 NOx를 말한다. Fig. 2-1과 같이 반응 초기에 화염면 근처에 잠깐 나타났다가 사라지므로 prompt NOx라고 한다.

과연료화염(fuel rich flame) 중에서 질소분자와 탄화수소는 N, CN 또는 HCN 형태로 빠르게 변환된 후 산화되어 NOx가 된다.

$$CH + N_2 \rightarrow HCN + N$$
 (2.4)

$$HCN + O \rightarrow NCO + H \tag{2.5}$$

$$NCO + H \rightarrow NH + CO$$
 (2.6)

$$NH + H \rightarrow N + H_2 \tag{2.7}$$

$$N + OH \rightarrow NO + H \tag{2.8}$$

이렇게 생성된 질소산화물을 prompt NOx라 부른다. 또한, thermal NOx 에 비하여 상대적으로 낮은 온도, 연료에 비하여 공기가 부족한 상태, 그리 고 연소에 걸리는 시간이 비교적 짧은 조건하에서 상대적으로 많이 생성된 다. Prompt NOx는 thermal NOx에 비하여 생성량이 극히 미약하므로 전 체 NOx 량이 매우 적을 때를 제외하고는 무시하여도 좋다.

#### 3) Fuel NOx

연료가 유기적으로 결합된 질소를 함유하고 있을 때 이 질소성분이 연소 시 산화되어 발생되는 NOx를 말한다. 연료중의 유기 질소는 공기 중의 질 소분자보다 결합력이 훨씬 약하기 때문에 NO로 쉽게 산화될 수 있다. 일 반적으로 석탄의 질소 함유율은 0.5~2%정도이며, 중유의 질소함량은 0. 1~ 0.5% 정도이다.

연료중의 질소가 산화하여 NOx로 전환되는 비율은 10~60% 사이로 공 기/연료비 및 연료와 공기와의 혼합정도 등의 연소조건이 전환율에 큰 영 향을 주는 것으로 알려져 있다. 연료 중 질소성분이 많은 석탄에서는 전체 NOx배출량의 90%이상을 차지하나 천연가스와 같이 질소성분이 거의 없는 경우에는 fuel NOx의 발생은 무시할 수 있다.



Fig. 2-1 Comparison of formation for prompt NOx, thermal NOx, and fuel NOx.

#### 2.1.2 NOx 저감 기술

#### 1) 배기가스 재순환 (exhaust gas recirculation, EGR)

배기가스 내의 NOx를 저감하는 한 방법으로, Fig2-2와 같이 불활성인 배기가스의 일부를 흡입 계통으로 재순환 시키고, 엔진에 흡입되는 혼합 가스에 혼합되어서 연소 시의 최고 온도를 내려 NOx의 생성을 적게 하는 장치이다.

EGR은 연소 혼합물을 희석시키기 위하여 배기가스 일부를 이용한다. 재 순환된 배기가스는 연료의 연소 중 발생되는 에너지의 일부를 흡수하여 최 고연소온도를 낮추어 NOx의 생성을 억제시키지만 엔진을 출력도 저하시 킨다. 가솔린엔진에서는 무리 없이 적용되고 있지만 디젤엔진의 경우 몇 가지 제약을 받는다. 대형 디젤기관의 경우 EGR 방식의 적용시에는 EGR 구성품의 오염과 신뢰성, 고부하에서 충분히 높은 EGR율을 달성하는가 외 에 과도상태에서 EGR 율의 제어능력과 응답성 등을 고려해야 한다<sup>5)</sup>.



Fig. 2-2 Exhaust gas recirculation system<sup>6)</sup>.

#### 2) SCR 시스템

SCR 시스템은 정화효율이 90% 이상으로 검증된 후처리 장치이다. SCR 시스템의 경우 배기부에서 직접 노즐을 통해 환원제를 분사하여 질소 산화 물을 저감한다. SCR 시스템에서 NH<sub>3</sub>가 질소 환원반응에 기여하지만, NH<sub>3</sub> 를 직접 분사하는 것은 보관 및 사용 측면에서 적합하지 않기 때문에 요소 수용액을 엔진 배기부에서 분사하는 방식을 사용하고 있다. 분사된 요소 수용액은 250~350℃의 배기열에 의해 기화, 열분해, 가수분해 과정을 거치 게 되는데 기화된 NH<sub>3</sub>가 배기가스와 함께 촉매층 내에서 물과 질소로 환 원되어 대기 중으로 배출된다.

이러한 SCR 시스템은 높은 정화 효율을 가진다는 장점이 있지만 초기 설비와 유지관리에 많은 비용이 든다는 단점이 있다. 특히 SCR 시스템에 서 NH<sub>3</sub>의 균일하지 못한 혼합은 암모니아 슬립(NH<sub>3</sub> slip)과 같은 요소의 불필요한 낭비를 일으키게 된다. 따라서 NOx의 저감 효율을 높이기 위해 서는 촉매부 전단에서 배기가스의 균일한 유동과 NH<sub>3</sub>와의 혼합 특성을 개 선하여 정화 효율을 높이려는 연구가 활발하게 진행되고 있다<sup>7)</sup>.

#### 2.2 Urea-SCR 시스템

#### 2.2.1 화학반응식

순수 무수 NH<sub>3</sub>는 환원제로서 SCR 시스템에 사용되어 왔다. 그러나 순 수 무수 NH<sub>3</sub>는 높은 압력에서 폭발 위험성이 있어 보관과 이동이 용이하 지 않고 인체에 유해하다. 이에 비해 요소 수용액은 안전하고 다루기 쉬우 며 독성이 없어 위험성도 없다. Fig. 2-3는 SCR 시스템의 NOx 저감 메커 니즘을 나타내고 있다<sup>8)</sup>.



Fig. 2-3 NOx reduction mechanism in SCR catalyst.

SCR 시스템에서 요소 수용액은 엔진 배기부에서 촉매부 전단까지 인젝 터를 통해 분사 된다. 요소 수용액은 다음과 같은 반응을 통해 분해가 된 다.

$$CO(NH_2)_2(aq) \rightarrow CO(NH_2)_2(s \text{ or } l) + 6.9H_2O(g)$$
 (2.9)

$$CO(NH_2)_2(s \text{ or } l) \rightarrow NH_3(g) + HNCO(g)$$
(2.10)

HNCO (g) + H<sub>2</sub>O (g)  $\rightarrow$  NH<sub>3</sub> (g) + CO<sub>2</sub> (g) (2.11)

이러한 반응을 통해 생성된 NH<sub>3</sub>는 NO와 반응하여 N<sub>2</sub>와 H<sub>2</sub>O로 환원한 다. NO가 제거되는 경로로는 세 반응이 대표적이다. NH<sub>3</sub>와 NO가 1:1로 반응하는 표준(standard) SCR 반응이 가장 중요하다.

급속(fast) SCR 반응은 같은 양의 NO와 NO2가 NH3와 반응하는 것으로

표준 SCR 반응보다 매우 빠른 것으로 알려져 있다. 300℃ 이하의 저온에 서 NOx의 저감 효과가 좋기 때문에 자동차의 경우, 이 반응을 활용하여 한정된 공간 문제를 해결하기 위한 시도가 이루어지고 있다. 급속 SCR 반 응을 일으키기 위해서 SCR 촉매부 전단에 산화 촉매를 설치하여 배기중의 NO를 NO<sub>2</sub>로 변환하기도 하는데, NO<sub>2</sub>가 과도하게 생성이 되면 급속 SCR 반응이 끝나고 남은 NO<sub>2</sub>가 저속(slow) SCR 반응에 사용된다. 저속 SCR 반응식은 식(2.14)와 같다<sup>9</sup>.

Standard : 
$$4NH_3 + 4NO + O_2 \rightarrow 4N_2 + 6H_2O$$
 (2.12)

Fast : 
$$4NH_3 + 2NO + 2NO_2 \rightarrow 4N_2 + 6H_2O$$
 (2.13)

Slow : 
$$8NH_3 + 6NO_2 \rightarrow 7N_2 + 12H_2O$$
 (2.14)

#### 2.2.2 SCR 촉매

NOx 저감을 위한 SCR 시스템은 수 년 동안 산업용 디젤엔진에 많이 사용되어 왔다. SCR 시스템에서 NOx는 촉매부 전단에서부터 NH<sub>3</sub>와 반응 한다. 바나듐(vanadium, V), 제올라이트(zeolite, 결정성 알루미노 규산염의 총칭), 백금(paltinum, Pt)을 사용하는 서로 다른 촉매 시스템은 서로 다른 활성창을 가지고 있으므로 사용 목적에 따라 주의 깊게 시스템을 설정해야 한다. SCR 촉매는 선박 엔진에서도 사용되고 있으며, 산업용으로 쓰이는 SCR 촉매는 서로 다른 여러 가지의 기하학적 구조로 구성되어진다. 일반 적으로 촉매 허니컴(honeycomb) 타입과 플레이트(plate) 타입의 두 가지 형태가 쓰인다. 허니컴 타입의 촉매가 표면적이 넓어서 더 경제적이다. 촉 매의 형상을 유지하는 기본 원료는 이산화티타늄(titanium dioxide, TiO<sub>2</sub>) 이며, 활성원료로 오산화바나듐(vanadium pentoxide, V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>)과 삼산화팅스 텐(tungsten trioxide, WO<sub>3</sub>)이 첨가된다. 촉매의 활성도는 운전 조건이나 화학적인 요인에 의해 낮아지기 때문에 공정 운전 조건에 맞는 촉매가 계획되어야 한다. Fig. 2-4에서 보여지는 촉매의 사용 온도 범위를 대략적으로 구분하면, 저온 촉매는 160~300℃, 중온 촉매는 280~420℃, 고온 촉매는 350~450℃ 정도이다. SCR 촉매로는 티타이아(titania-), 바나디아(vanadia-) 등이 사용되고 있다. 저온용 및 고 온용 촉매로 바나디아/티타니아(vanadia/titania) 촉매가 개발되었으며 현재 가장 많이 사용되고 있다.



Fig. 2-4 Operating temperature windows for different SCR catalyst.

SCR 촉매는 높은 NOx 저감 효율에도 불구하고, 요소 수용액 탱크, 요 소 수용액 인젝터 등 많은 부가 장치를 필요로 하고 있어, 이로 인한 공간 확보, 원가 상승 등의 어려움을 극복해야하는 과제를 가지고 있다. 특히 배 출가스 온도 저하에 대비한 저온 NH<sub>3</sub>의 흡착 성능 향상에 대해 개발이 많 이 이루어지고 있다<sup>10)</sup>.

#### 2.3 지배 방정식

#### 2.3.1 난류 모델<sup>11)</sup>

난류 모델로는 k-ε 모델을 사용하였으며, k는 난류운동에너지, ε은 난동 소산율을 나타낸다.

#### 1) 표준 k-ε 모델(standard k-ε model)

표준 k-c 모델의 수송 방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial_t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}[(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k})\frac{\partial k}{\partial x_j}] + G_k + G_b - \rho\varepsilon - Y_M + S_k \qquad (2.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial_t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon})\frac{\partial_\varepsilon}{\partial x_j}\right] + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}(G_k + C_{3\varepsilon}G_b) - C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{k} + S_{\varepsilon}$$
(2.16)

여기서, 계수  $C_{1e}, C_{2e}, \sigma_k, \sigma_e$ 는 경험 상수이며,  $G_k$ 는 난류운동에너지의 생성항이다.

$$G_k = \mu_t \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i}$$
(2.17)

난류 점성 계수를 구하는 식은 다음과 같다.

$$\mu_t = \rho C_{\!\mu} \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{2.18}$$

여기서 Cu는 상수이다.

$$C_{1\varepsilon}=1.44,\,C_{2\varepsilon}=1.92,\,C_{\!\mu}=0.09,\,\sigma_k=1.0,\,\sigma_{\varepsilon}=1.3$$

#### 2) RNG k-ε 모델

k-ε 방정식에서 상수들은 실험값을 통해 실증적으로 얻는 반면, RNG 모델은 환치 계산법 집단 이론(renormalization group theory)을 이용하여 분석적으로 구하게 된다. 난동 소산율 또한 수정 되었다. 큰 변형율(strain rate)을 갖는 유동 및 박리(separation) 유동에서 표준 k-ε 모델보다 더 좋 은 결과를 보여준다.

$$\frac{\partial}{\partial_t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}[(a_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_j}] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \qquad (2.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial_t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}[(a_\varepsilon\mu_{eff}\frac{\partial_\varepsilon}{\partial x_j}] + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}(G_k + C_{3\varepsilon}G_b) - C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{k} + S_{\varepsilon}$$
(2.20)

여기서, 
$$C_{\mu} = 0.0845$$
이다.

#### 3) Realizable k-ε 모델

난동 소산율은 mean-square vorticity fluctuation을 이용하여 유도되어 지며, 표준 k-ɛ 모델과는 근본적으로 다르다. 회전을 포함한 유동(flows involving rotation), 역 압력 구배에서의 경계층, 박리와 재순환 유동에서 보다 향상된 성능을 보여준다.

$$\frac{\partial}{\partial_t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (2.21)$$

$$C_1 = \max\left[0.43, \frac{\eta}{\eta+5}\right], \ \eta = S\frac{k}{\varepsilon}, \ S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$$

Realizable  $k-\varepsilon$  모델에서는  $C_{\mu}$ 가 더 이상 상수가 아니다.

$$C_{\mu} = \frac{1}{A_0 + A_s \frac{kU^*}{\varepsilon}}$$
(2.23)

여기서,

$$U^* \equiv \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \widetilde{\Omega}_{ij}\widetilde{\Omega}_{ij}}$$
(2.24)

$$\widetilde{\Omega}_{ij} = \Omega_{ij} - 2\varepsilon_{ijk}\omega_k, \ \Omega_{ij} = \overline{\Omega_{ij}} - \varepsilon_{ijk}\omega_k$$
(2.25)

로 정의된다.

상수  $A_0 = 4.04, \ A_s = \sqrt{6}\cos\phi$  이다.

#### 2.3.2 분사 모델<sup>12)</sup>

분사 모델로는 라그랑지안(Lagrangian) 방법으로 액적의 궤적을 계산하 는 이상 유동 모델(Discrete Phase Model, DPM)을 사용하였다. 가스상과 운동량, 질량, 에너지를 서로 교환할 수 있지만 개별 입자들 간의 영향력은 고려하지 않는다. 양방향 결합(2-way coupling) 방법을 사용하여 유체는 난류 효과를 통해 입자에 영향을 주고, 입자는 질량, 운동량, 에너지 방정 식 등의 소스항을 통해 유체에 영향을 주도록 계산을 수행하였다.

액적의 모양은 완전한 구형이고 건조되는 동안 형태상의 변형이 생기지 않으며 액적들의 상호간 영향은 무시할 수 있다고 가정한다. 이에 따라 액 적의 속도는 항력과 중력의 항으로써 다음과 같이 나타낸다.

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(\vec{u} - \vec{u_p}) + \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + \vec{F}$$
(2.26)

여기서  $\overrightarrow{F}$ 는 추가 가속도 항이고,  $F_D(u-u_p)$ 는 한 개의 액적당 항력항으로 다음과 같다.

$$F_D = \frac{18\mu}{\rho_p d_p^2} \frac{C_D Re}{24}$$
(2.27)

여기서 레이놀즈수 (Re)는 다음과 같다.

$$Re = \frac{\rho d_p \left| \overrightarrow{u_p} - \overrightarrow{u} \right|}{\mu} \tag{2.28}$$

#### 2.3.3 증발 모델<sup>13)</sup>

액적이 증발하기 위해서는 식(2.29), 식(2.30)과 같은 초기 조건이 필요하 다.

$$T_{vap} \le T_p < T_{bp} \tag{2.29}$$

$$m_p > (1 - f_{v,0})m_{p,0} \tag{2.30}$$

T<sub>vap</sub>가 되는 것이 증발이 시작 조건이며, 이후로는 입자의 온도가 T<sub>vap</sub>
 보다 떨어지게 된다 해도 증발이 일어나게 된다. 증발이 멈추게 되는 조건
 은 오직 입자의 온도가 이슬점 밑으로 떨어지게 될 때뿐이다.

## 1) 확산 증발 모델(diffusion controlled model)

증발 속도가 느릴 때, 가스 상의 증기 흐름에 관련하여 액적 표면 및 벌 크 가스의 증기 농도 차이에 대해 확산이 적용 된다고 가정할 수 있다.

$$N_i = k_c (C_{i,s} - C_{i,\infty})$$
(2.31)

ANSYS FLUENT에서는 증발이 일어날 때의  $N_i$ 를 양의 수로 가정한다.  $N_i$ 가 음의 수로 나오게 되면 그 것은 액적의 온도가 이슬점 밑으로 내려 갔음을 말하며,  $N_i = 0.0$ 인 불활성 기체로 취급한다.

분압이 포화 증기압과 동일하다고 가정함으로써 액적 표면의 증기의 농 도에 대해 측정이 가능하다.

$$C_{i,s} = \frac{P_{sat}(T_p)}{RT_p} \tag{2.32}$$

벌크 가스의 증기 농도는 비혼합 또는 부분적인 예혼합 연소의 계산식의 수송방정식에 관련해 알 수 있다.

$$C_{i,\infty} = X_i \frac{p}{RT_{\infty}} \tag{2.33}$$

#### 2) 대류/확산 모델(convection/diffusion controlled model)

높은 기화율에 대해, 대류 유동은 벌크 가스상의 입자 표면의 증발성 물 질에 영향을 주며 중요하다.

$$\frac{dm_p}{dt} = k_c A_p \rho_{\infty} \ln\left(1 + B_m\right) \tag{2.34}$$

B<sub>m</sub>에 대한 식은 다음과 같다.

$$B_m = \frac{Y_{i,s} - Y_{i,\infty}}{1 - Y_{i,s}}$$
(2.35)

#### 3) 다성분 입자의 정의

#### (multicomponent particle definition)

다성분 물질이란, 입자 액적에 여러 가지 성분 또는 물질이 섞여있는 것을 말한다.

$$m = \sum_{i} m_i \tag{2.36}$$

입자의 밀도인 ρ<sub>p</sub>에 대해서는 일정하거나 아니면 공간에 대한 평균으로 도 나타낼 수 있다.

$$\rho_p = \left(\sum_{i} \frac{m_i}{m\rho_i}\right)^{-1} \tag{2.37}$$

확산 증발 모델일 경우 성분 i에 대해 정리를 하면 다음과 같다.

$$\frac{dm_i}{dt} = A_p M_{w,i} k_{c,i} (C_{i,s} - C_{i,\infty})$$
(2.38)

대류/확산 모델에 대해서 정리하면 다음과 같다.

$$\frac{dm_i}{dt} = A_p k_{c,i} \rho_{\infty} \ln\left(1 + B_{m,i}\right) \tag{2.39}$$

#### 2.3.4 벽막 모델(wall-film model)

벽면와 입자 사이의 충돌이 있을 경우, 서로의 상호 작용을 정확히 예측 하기 위해 벽막 모델을 사용하였다. 벽막 모델은 벽에 충돌한 입자가 얇은 액막을 형성하는 모델이다. 형성된 액막의 두께는 매우 얇기 때문에 액막 안은 층류로 가정하고, 벽면으로부터 액막 끝까지의 속도 분포는 선형적으 로 변한다고 가정한다. 또한 액막 내부에서의 중력에 의한 영향은 무시한 다.

#### **Major Physical Phenomena**



Fig. 2-5 Mechanisms of splashing, momentum, heat and mass transfer for wall-film.

Fig. 2-5는 벽막 모델에서의 기본적인 메커니즘을 보여준다. 이 메커니 즘을 기본으로 벽에 충돌한 입자는 벽의 온도와 충돌 에너지에 의해 Fig. 2-6과 같은 4가지 형태로 변환되다. 벽에 붙는 현상(stick), 벽에 충돌하여 여러 액적으로 분리되는 형상(splash), 벽에 붙어서 퍼지는 현상(spread), 충돌 후 다시 튕겨져 나가는 현상(rebound)이다.



Fig. 2-6 Impingement regimes of a single drop impacting a unheated dry wall.

Fig. 2-7의 T<sub>b</sub>는 입자의 끓는 온도, T<sub>w</sub>는 벽의 온도를 나타내며 충돌된 입자의 벽면에 대한 충돌에너지 (E)는 다음과 같다.

$$E^{2} = \frac{\rho V_{r}^{2} d_{p}}{\sigma} \left(\frac{1}{\min(h_{0}/d_{p}, 1) + \delta_{bl}/d_{p}}\right)$$
(2.40)



Fig. 2-7 Simplified decision chart for wall interaction criterion.

여기서,  $V_r$ 은 입자의 벽면에 대한 상대 속도  $(V_r^2 = (V_p - V_w)^2)$ ,  $\sigma$ 는 입자 의 표면 장력,  $h_0$ 는 벽막의 높이를 나타낸다.  $\delta_{bl}$ 은 경계층의 두께로서

$$\delta_{bl} = \frac{d_p}{\sqrt{Re}} \tag{2.41}$$

으로 정의된다.



## 3. 수 치 해 석

#### 3.1 수치해석 기법

배기관에 분사 되는 요소 수용액의 증발 및 혼합특성에 대해 알아보기 위해 ANSYS FLUENT R15.0을 사용하여 수치해석하였다. 입자의 분포 거동을 해석하기 위해 연속체의 성격이 뚜렷한 주변의 기체 유동장에 대해 서는 오일러(Euler) 관점으로, 비연속적인 입자들의 거동 특성을 가지는 요 소 수용액의 분무 입자들은 라그랑지안(Lagrangian) 관점으로 수치해석하 였다. 난류 모델로는 계산 시간은 오래 걸리지만, 가장 정확하게 분석되어 지는 realizable k-ε model을 적용하였으며, 벽함수(wall function)으로는 측정 가능한 벽함수(scalable wall function)를 적용하였다. Scalable wall function은 벽 인극 격자가 재배열(refinement) 되는 모순을 피하기 위해 사용되었다. 벽면에서의 유동을 분석하기 위해 벽막 모델을 사용하였다. 액 막은 다성분 입자 모델을 사용하여 요소 수용액을 설정하였다.

수치해석 결과에 사용되는 NH<sub>3</sub> 변환율과 균일도(γ<sub>a</sub>)에 대한 식은 다음 과 같다.

$$NH_3 \text{ conversion ratio} = \frac{Actual NH_3 \text{ formation}(kmol)}{Theoretical NH_3 \text{ formatio}(kmol)}$$
(3.1)

$$\gamma_a = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} \left[ \left( \left| \phi_i - \overline{\phi_a} \right| \right) A_i \right]}{2 \left| \overline{\phi_a} \right| \sum_{i=1}^{n} A_i}$$
(3.2)

변수에 대한 단면 평균을 나타내는  $\phi_a$ 는 다음과 같이 나타낸다.

$$\overline{\phi_a} = \frac{\sum_{i=1}^n \phi_i A_i}{\sum_{i=1}^n A_i}$$
(3.3)

#### 3.2 CFD 모델링

본 연구에서는 SCR 시스템에서 인젝터를 통해 분사되는 요소 수용액의 분사 조건에 따른 NH<sub>3</sub>의 변환율 개선 및 비교 연구를 수행하기 위해 배기 관을 원통형으로 하여 수치해석을 하였다. 배기관의 총 길이는 6.2 m이며 내경은 0.3 m이다. 인젝터는 엔진 배기부에서 0.2 m 떨어진 곳 에 위치하였으며 요소 수용액은 엔진 배기부에서 촉매부 전단으로 분사된 다. 믹서의 위치는 엔진 배기부에서 0.7 m 떨어진 곳에 위치하고 있다.



Fig. 3-1 CFD modeling for SCR system.

본 연구에서는 배기가스의 조성치를 Table 3-1과 같이 설정하였다. 배기 가스의 조성치는 일정하게 정해져 있는 것이 아닌 엔진 출력이나 온도 등 의 영향을 받는 변수이기 때문에 정확한 값을 얻기가 어려워 모든 해석에 서 부하에 상관없이 동일하게 설정하였다. Table 3-1 Composition varies from diesel engines.

Material	Mass Fraction
N <sub>2</sub>	0.743
O <sub>2</sub>	0.113
H <sub>2</sub> O	0.081
CO <sub>2</sub>	0.03
NO	0.00225
SO <sub>2</sub>	0.0003

#### 3.3 수치해석 조건

믹서의 형상 및 요소 수용액의 분사 각도, 배기가스 온도와 배기가스 속 도에 따른 NH<sub>3</sub>의 변환율에 대해 해석을 진행하였으며, 각각에 대한 조건 은 다음과 같다.

#### 3.3.1 믹서 형상

믹서의 형상에 따른 촉매부 전단에서의 NH<sub>3</sub>의 변환율과 비교하였다. 비 교 형상으로는 믹서를 설치하지 않은 배기관, 베인형의 믹서(vane type mixer), 버티컬형의 믹서(vertical type mixer)로 정하였다.

Fig. 3-2는 믹서의 형상을 나타낸 것이며, (a)는 베인형 믹서, (b)는 버티 컬형 믹서이다.



Fig. 3-2 CFD modeling for mixer. (a) vane type, (b) vertical type.

배기가스는 6 m/s의 속도를 가지고 400℃의 온도로 유입되며, 요소 수용 액은 인젝터를 통해 10.6 m/s로 분사되도록 설정하였다.

Table 3-2 Boundary and urea injection conditions for mixer configuration.

Variables	Unit	Value
Gas temperature	°C	400
Gas velocity	m/s	6
UWS flow rate	kg/s	0.00033
UWS velocity	m/s	10.6
UWS injection cone angle	deg	70
Urea mass fraction	-	0.4

#### 3.3.2 요소 수용액 분사 각도

믹서를 추가하는 것이 SCR 시스템에서 효율적이라는 것을 먼저 확인한 후, 배기가스 유동 방향과 역 방향으로 요소 수용액을 분사하여 베인형 믹 서와 버티컬형 믹서를 비교하였고, 유동 방향을 기준으로 분사 각도에 따 라 비교하였다. 다른 조건은 모두 Table 3-3과 같으며, 요소 수용액의 분 사 각도를 배기가스 유동 방향을 기준으로 상 방향 15°, 45°로 하여 비교 하였다.

Variables	Unit	Value
Gas temperature	°C	400
Gas velocity	m/s	6
UWS flow rate	kg/s	0.00033
UWS velocity	m/s	10.6
UWS injection reference axis	-	Z
UWS injection angle	deg	0, +Y 15, +Y 45
UWS injection cone angle	deg	70
Urea mass fraction	_	0.4

Table 3-3 Boundary and urea injection conditions for injection angle.

#### 3.3.3 배기가스 온도에 따른 NH₃의 변환율

온도가 NH<sub>3</sub>의 생성에 영향을 주는지 알아보기 위해 배기가스의 유입 온 도를 150~400℃로 하여 각 온도별 NH<sub>3</sub>의 변환율을 비교해보았다. 온도 및 나머지 설정 조건들에 대해서 Table 3-4에 정리하였다. NOx의 정화 효 율을 위해 NH<sub>3</sub>가 많이 변환될수록 좋지만, 사용하는 촉매에 따라 적정 온 도가 다르기 때문에 NH<sub>3</sub> 슬립이 발생하는 문제도 고려하여 NH<sub>3</sub>의 변환율 의 기준치를 85%로 하여, 조건에 부합하는 최소한의 배기가스 온도를 알 아보았다.

Variables	Unit	Value
Gas temperature	°C	150~400°C
Gas velocity	m/s	6
UWS flow rate	kg/s	0.00033
UWS velocity	m/s	10.6

Table 3-4 Boundary and urea injection conditions for gas temperature.

#### 3.3.4 배기가스 속도에 따른 NH₃의 변환율

배기가스의 유입 속도가 NH<sub>3</sub>의 생성에 영향을 주는지 알아보기 위해 속 도를 6 m/s, 8 m/s, 10 m/s로 하여 각 속도별 NH<sub>3</sub>의 변환율을 비교해보 았다. 속도 및 나머지 설정 조건들에 대해서 Table 3-5에 정리하였다. 배 기가스의 온도는 370℃로 하였으며, 이는 앞선 수치해석에서 배기가스 온 도가 350℃ 이상이 효율적인 것을 확인하고, 가야호의 실험 데이터를 참고 하여 정한 값이다.

Variables	Unit	Value
Gas velocity	m/s	6, 8, 10
Gas temperature	°C	370°C
UWS flow rate	kg/s	0.00033
UWS velocity	m/s	10.6

Table 3-5 Boundary and urea injection conditions for gas velocity.

#### 3.4 수치해석 신뢰성 검증

SCR 시스템의 엔진 배기부에서 분사되는 요소 수용액의 증발 및 혼합 특성에 관한 전산 해석을 수행하기 위하여 ANSYS FLUENT R15.0을 이 용하여 선행 연구된 실험 결과<sup>3)</sup>와 본 전산 해석의 NH<sub>3</sub> 변환율을 비교하여 요소 수용액의 열분해 현상에 대한 수치해석의 검증을 진행하였다. 선박에 사용되는 SCR 시스템에 대하여 실험 장치를 꾸미기에는 제약이 많아 수치 해석의 비교 값으로 사용할 실험 데이터를 얻지 못하였다. 따라서, 실제 실 험 장치를 꾸며 실험한 데이터와 수치해석을 하여 얻은 데이터를 비교한 논문<sup>3)</sup>이 신뢰성 검증을 하는데 적합하다고 판단되었다.

본 연구의 검증에 사용된 형상의 개략도를 Fig. 3-3에 나타내었다. 배기 관은 내경 300 mm, 길이 6.2 m이며, 요소 수용액은 노즐을 통해 분사각 70°의 각도로 엔진 배기부에서부터 촉매부 전단으로 분사가 된다. 세 개의 측정 위치(sampling points)는 배기관 내에서 인젝터로부터 촉매부 전단으 로 3 m, 4.5 m, 그리고 6 m인 곳에 위치한다.

본 검증에 적용한 해석 조건으로는 배기가스가 6.4 및 8.3 m/s의 속도와 350℃, 400℃의 온도로 엔진 배기부 단면에서 유입이 된다. 인젝터를 통해 분사되는 요소 수용액의 유량은 0.0003 kg/s 이며, 10.6 m/s의 초기 속도를 가진다. 이 조건들을 Table 3-6, Table 3-7에 정리하여 나타내었고, 각각 의 측정 위치에서의 NH<sub>3</sub>의 변환율을 비교함으로써 검증을 수행하였다.



Fig. 3-3 Sketch of the experimental setup of Kim  $et al^{14}$ .

Table 3-6 Boundary conditions used for validation of Kim  $et al^{3}$ .

Variables	Unit	Value
Gas temperature	°C	350, 400
Gas velocity	m/s	6.4, 8.3
Injection pressure	bar	2
UWS flow rate	kg/s	0.0003
Cone angle from injection	deg	70
Initial droplet velocity	m/s	10.6

Table 3-7은 배기관으로 유입되는 배기가스의 조성을 나타내며, 실험 논 문<sup>3)</sup>에서는 배기가스의 조성이 나타나있지 않기 때문에 LNG가 완전 연소 하였다는 조건하에 계산하여 구하였다. Table 3-7 Conditions of the combustion gases.

Material	Mass Fraction
N <sub>2</sub>	0.756
O <sub>2</sub>	0.116
H <sub>2</sub> O	0.085
CO <sub>2</sub>	0.043

6.4 m/s 및 8.3 m/s의 유입 속도와 350℃ 및 400℃의 배기가스 온도 조 건에서 체류 시간에 따른 요소 수용액의 NH<sub>3</sub>로의 변환율을 Fig. 3-4에 나 타내었다. 유입 배기가스 속도 6.4 m/s 및 8.3 m/s에 대하여 각각 0.3~1.0 s의 체류시간에 대하여 NH<sub>3</sub>의 변환율을 측정하였다.

Fig. 3-4는 본 연구의 전산 해석 결과와 실험 논문<sup>3)</sup>의 실험값을 비교한 결과를 나타낸 것이며, 오차율이 각각 0.77%, 2.89%로, NH<sub>3</sub>의 변환율이 잘 일치하는 것을 확인할 수 있었다.



Numerical calculations	
<b>-</b> •T = 350℃, U = 6.4 m/s	T = 400℃, U = 8.3 m/s



#### 4. 결과 및 고찰

본 연구에서는 믹서의 형상 변경, 믹서의 형상에 따른 요소 수용액 분사 각도, 그리고 배기가스 온도에 따른 NH<sub>3</sub>의 변환율에 대해 수치해석하였다.

#### 4.1 믹서 형상에 따른 결과

Fig. 4-1는 믹서가 없는 배기관을 x-y 평면을 기준으로 하여 중앙을 자 른 단면이며, 각 물질의 농도 분포와 온도 분포를 나타낸 것이다.



Fig. 4-1 Contour of Mass fraction of none mixer pipe at X-Y plane.

요소 수용액이 인젝터를 통해 엔진 배기부에서 촉매부 전단 쪽으로 분사 된 것을 볼 수 있고, 액적 표면의 H<sub>2</sub>O가 증발하여 요소가 생성된 것을 알 수 있다. NH<sub>3</sub>의 농도 분포를 보게 되면 인젝터를 통해 분사된 요소 수용 액이 열분해 되어 NH<sub>3</sub>가 생성이 되었음을 알 수 있다. NH<sub>3</sub>는 인젝터 부근 에서 가장 많이 생성이 되었으며, 배기가스의 유입 속도와 방향에 따라 이 동하며 반응을 하고 있음을 알 수 있다. H<sub>2</sub>O와 HNCO의 분포가 점차 줄 어드는 것은 식 (2.11)의 추가 반응 때문이며, 최종적으로 NH<sub>3</sub>가 생성된다. 또한, 온도 분포를 보게 되면, NH<sub>3</sub>의 농도 분포와 비슷한 것을 알 수 있 다. 이는 화학 반응 시 흡열반응이 일어났으며, 온도가 NH<sub>3</sub> 생성에 영향을 준다는 것을 나타내고 있다.

Fig. 4-2는 원통형 배기관을 단면으로 잘랐을 때의 수치해석 결과이다. (a)는 단면의 측정위치를 나타내며, (b)는 각 물질의 농도를 나타낸다. 1번 위치는 배기관 입구에서부터 0.2 m 떨어진 인젝터 분사면의 단면이며, 2번 위치는 배기관 입구에서부터 1.2 m 떨어진 곳, 3번 위치는 3.2 m 떨어진 곳이며 4번 위치는 SCR 촉매부 전단면을 나타냈다.



Fig. 4-2 Measurement positions and contours of mass fraction.(a) measurement positions, (b) contours of mass fraction.

Table 4-1는 믹서 형상에 따른 촉매부 전단에서의 NH<sub>3</sub> 변환율과 균일도, 배기관 내에서의 난류운동에너지를 나타낸 것이다. Table. 4-1를 보면 베인 형의 믹서의 NH<sub>3</sub>의 변환율이 믹서가 없는 배기관보다 27.86% 증가 하였 으며, 균일도는 97.22% 증가한 것을 알 수 있다. 또한 베인형 믹서의 난류 운동에너지가 믹서가 없는 배기관보다 497.49% 증가하였음을 알 수 있다.

믹서를 지나는 유체가 날개 방향으로 복잡하게 혼합되어 와류를 발생시 킨다. 이 경우 믹서를 지난 유체는 유동의 흐름에 영향을 받아 강하게 혼 합이 되어 NH<sub>3</sub>의 생성에 영향을 주는 것을 알 수 있다.

Fig. 4-2를 보면, 믹서가 없는 배기관의 경우 배기관 중심에 NH<sub>3</sub>가 집 중되었음을 알 수 있다. 그러나 믹서가 있는 경우인 Fig. 4-3, Fig. 4-4를 보게 되면, 촉매부 전단 위치에서 NH<sub>3</sub>가 전체적으로 퍼져 있음을 알 수 있다. 따라서, NH<sub>3</sub>의 생성 효율뿐만 아니라 촉매부 전단에서의 균일도에도 영향을 주기 때문에 믹서를 설치하는 것이 효율적임을 알 수 있다.

Table 4–1 Effect of mixer type on  $NH_3$  conversion ratio,  $NH_3$  uniformity and turbulence kinetic energy.

Mixer Type	Conversion Ratio (%)	Uniformity (%)	Turbulence Kinetic Energy (J/kg)
None	76.8	50.3	0.0991
Vane	98.2	99.2	0.59211
Vertical	98.0	96.6	0.496888

Fig. 4-3는 베인형 믹서가 있는 배기관의 NH<sub>3</sub>의 농도 분포를 나타낸 것 이다. (a)는 x-y평면을 기준으로 하여 중앙을 자른 단면의 NH<sub>3</sub>의 농도 분 포, (b)는 촉매부 전단에서의 NH<sub>3</sub>의 농도 분포를 나타낸 것이다. 믹서를 지나면서 NH<sub>3</sub>가 급격하게 생성된 것을 확인 할 수 있다. 또한, 베인형 믹 서의 날개 모양에 따라 NH<sub>3</sub>가 중앙에 분포하는 것을 알 수 있다.



Fig. 4-3 Contours of NH<sub>3</sub> mass fraction of vane type mixer.(a) at X-Y plane, (b) in front of SCR catalyst.

Fig. 4-4는 버티컬형 믹서가 있는 배기관의 NH<sub>3</sub>의 농도 분포를 나타낸 것이다. (a)는 x-y평면을 기준으로 하여 중앙을 자른 단면의 NH<sub>3</sub>의 농도 분포, (b)는 촉매부 전단에서의 NH<sub>3</sub>의 농도 분포를 나타낸 것이다. NH<sub>3</sub>가 버티컬형 믹서를 지나면서 날개의 방향에 따라 상·하로 나뉘어 분포하는 것을 알 수 있다.



Fig. 4-4 Contours of NH<sub>3</sub> mass fraction of vertical type mixer.(a) at X-Y plane, (b) in front of SCR catalyst.

Fig. 4-5는 촉매부 전단에서의 NH<sub>3</sub>의 농도 분포를 나타낸 것이다. (a)는 베인형 믹서, (b)는 버티컬형 믹서의 NH<sub>3</sub> 질량분율을 나타낸 것이다. 균일 도는 차이가 없으나 NH<sub>3</sub>가 베인형 믹서는 단면의 중앙부에, 버티컬형의 믹서는 상부 쪽으로 위치하고 있음을 알 수 있다. 이에 믹서의 형상에 따 라 균일도가 영향을 받는 것을 알 수 있다. 목적에 따라 믹서의 형상을 결 정하면 되는 것으로 보인다.



Fig. 4-5 Contours of NH<sub>3</sub> mass fraction at SCR catalyst area.(a) vane type mixer, (b) vertical type mixer.

Fig. 4-6는 베인형 믹서가 있는 배기관의 난류운동에너지의 분포를 나타 낸 것이다. (a)는 x-y평면을 기준으로 하여 중앙을 자른 단면의 난류운동 에너지 분포, (b)는 촉매부 전단에서의 난류운동에너지 분포를 나타낸 것 이다. 믹서를 지나면서 난류운동에너지가 증가한 것을 확인할 수 있으며, 베인형 믹서의 날개 모양에 따라 원형으로 중앙 쪽에 난류운동에너지가 분 포하고 있음을 알 수 있다.



Fig. 4-6 Contours of turbulent kinetic energy of vane type mixer.(a) at X-Y plane, (b) in front of SCR catalyst.

Fig. 4-7는 버티컬형 믹서가 있는 배기관의 난류운동에너지의 분포를 나 타낸 것이다. (a)는 x-y평면을 기준으로 하여 중앙을 자른 단면의 난류운 동에너지 분포, (b)는 촉매부 전단에서의 난류운동에너지 분포를 나타낸 것이다. 믹서를 지나면서 난류운동에너지가 증가한 것을 확인할 수 있으며, 버티컬형 믹서의 날개 모양에 따라 양 옆으로 난류운동에너지가 분포하고 있음을 알 수 있다.



Fig. 4-7 Contours of Turbulent kinetic energy of vertical type mixer.(a) at X-Y plane, (b) in front of SCR catalyst.

Fig. 4-8는 배기관은 x-y 평면을 기준으로 하여 중앙을 자른 단면이며 난류운동에너지를 나타낸 것이다. (a)는 믹서가 없는 것, (b)는 베인형 믹 서, (c)는 버티컬형 믹서의 난류운동에너지를 나타낸 것이며, 믹서를 지나 면서 난류가 발생했음을 확인할 수 있다. 베인형 믹서와 버티컬형 믹서의 난류운동에너지 분포를 비교하면, 베인형의 믹서의 난류운동에너지가 좀 더 길게 분포된 것을 확인할 수 있다. 이는 믹서의 날개 모양에 따라 와류 가 길게 형성되었다는 것을 나타내며, 베인형 믹서의 효율이 버티컬형 믹 서보다 좋다는 것을 알 수 있다.



Fig. 4-8 Contours of turbulent kinetic energy. (a) none mixer type.(b) vane type mixer. (c) vertical type mixer.

Fig. 4-9는 믹서가 없는 배기관, 베인형 믹서, 버티컬형 믹서의 난류운동 에너지와 NH<sub>3</sub>의 변환율에 대해 나타낸 것이다. X축은 배기관 입구에서부 터 0.1 m간격으로 측정하여 나타낸 것이며, Y축은 그 위치에서의 난류운 동에너지와 NH<sub>3</sub>의 변환율을 나타내고 있다. 믹서가 없는 배기관의 경우 난류운동에너지의 변화가 거의 없지만, 베인형 믹서과 버티컬형 믹서가 0.7 m에서 난류운동에너지가 급격하게 증가함을 알 수 있는데, 이는 0.7 m 의 위치에 있는 믹서를 지나면서 난류가 발생했기 때문이다. 이에 따라 0.9 m의 위치에서 NH<sub>3</sub>의 생성량이 급격하게 증가한 것을 알 수 있고, 난류운 동에너지의 증가와 관련이 있다는 것을 확인할 수 있다. Fig. 4-9의 NH<sub>3</sub> 변환율은 NH<sub>3</sub>의 몰분율(mole fraction)로 나타낸 것으로, 0.9 m 이후 NH<sub>3</sub> 가 생성되었다가 소멸되었다는 뜻이 아닌, 분자량이 큰 물질이 생성됨으로 서 NH<sub>3</sub>의 몰분율이 감소했다는 것을 나타낸다.



Fig. 4–9 Comparison of turbulent kinetic energy and NH<sub>3</sub> conversion ratio for mixer type.

베인형 믹서의 경우 난류강도가 길게 분포하는 경향을 보이며, 형성거리 가 길어졌음을 알 수 있다. 따라서 베인형 믹서의 경우 믹서를 지나 촉매 부 전단까지로 진행될수록 유동혼합 특성이 개선될 수 있을 것으로 예상된 다.

#### 4.2 요소 수용액 분사 각도에 따른 결과

Table 4-2는 믹서가 없는 배기관의 분사 각도에 따른 해석 결과이다. 배 기가스 유동 방향으로 분사하였을 때와 역방향으로 분사하였을 때를 비교 하였다. 배기가스 유동 방향으로 분사하였을 때, 모든 분사 각도에서의 NH<sub>3</sub> 변환율과 균일도가 좋다는 것을 알 수 있다. 요소 수용액을 배기가스 유동의 역방향으로 분사할 경우, 배기관 내에서의 체류 시간이 길어 배기 관 하단부로 쌓이는 요소가 증가하고 그만큼 변환 효율이 떨어짐을 알 수 있다. 또한 배기가스의 속도가 느린 저속 운전시에는 요소 수용액이 증발 하기 전에 배기관의 벽면에 부딪혀 벽면에 점착되는 월 웨팅(wall wetting) 현상을 고려해야 할 것으로 생각된다.

따라서, 배기가스 유동 방향으로 분사를 하여 믹서 형상에 따른 분사 각 도에 대해 해석을 진행하였다. 또한, Table 4-2를 보면 분사각도가 배기가 스 유동 방향을 기준으로 상 방향으로의 각도가 클수록 변환이 잘 되는 것 을 볼 수 있다.

Direction	Flow direction		Flow opposite direction	
Angle	Conversion Ratio (%)	Uniformity (%)	Conversion Ratio (%)	Uniformity (%)
0	76.2	43.8	73.8	41.6
+Y 15°	79.2	52.5	78.8	52.0
+Y 45°	89.0	43.3	87.5	40.3

Table 4-2 Effect of injection angle.

Fig. 4-10은 믹서가 없는 배기관의 NH<sub>3</sub>의 농도 분포를 나타낸 것이다. (a)는 x-y평면을 기준으로 하여 중앙을 자른 단면의 NH<sub>3</sub> 농도 분포, (b)는 촉매부 전단에서의 NH<sub>3</sub> 농도 분포를 나타낸 것이다.



Fig. 4-10 Contours of NH<sub>3</sub> mass fraction of none mixer type.(a) at X-Y plane, (b) in front of SCR catalyst.

Fig. 4-10을 보면 생성된 NH<sub>3</sub>는 중력의 작용으로 인해 배기관 하단 쪽 으로 이동하게 된다는 것을 알 수 있다. 분사 각도를 배기가스 유동 방향 을 기준으로 상 방향으로 설정하게 되면 배기관내의 체류 시간이 길어지고 같은 시간동안 배기관 하단에 쌓이는 요소 수용액의 양이 적어져 NH<sub>3</sub>의 변환율이 좋은 것으로 생각된다. 또한, 각도가 너무 커지게 되면 월 웨팅 현상이 일어나게 되므로 45°가 가장 좋은 분사 조건이라고 판단된다.

#### 4.3 배기가스 온도에 따른 NH3의 변환율의 해석 결과

Table 4-3는 배기가스 온도에 따른 NH<sub>3</sub> 변환율과 촉매부 전단에서의 온도를 나타낸 것이다. (a)는 베인형 믹서, (b)는 버티컬형 믹서에 대한 표 이다. 촉매부 전단에서의 온도가 배기가스 온도보다 평균적으로 약 3℃ 정 도 떨어진 것을 알 수 있고, 이는 배기관 내에서 흡열반응이 일어나기 때 문이다. Table 4–3 Effect of temperature of  $NH_3$  conversion efficiency and catalyst temperature.

Vane type				
Gas	Conversion Ratio (%)	Catalyst		
Temperature (°C)		Temperature (°C)		
150	23.6	147.95		
200	51.4	197.00		
250	56.2	246.67		
300	68.8	296.43		
350	86.8	346.31		
400	98.2	396.08		

1			•
(a)	vane	type	mixer.

(b) vertical type mixer.

Vertical type				
Gas	Conversion Datio $(\%)$	Catalyst		
Temperature (°C)		Temperature (°C)		
150	19.8	148.05		
200	51.4	197.01		
250	56.1	246.67		
300	68.1	296.36		
350	86.8	346.20		
400	97.7	396.06		

(b)

Fig. 4-11에서 배기관 내의 온도가 높을수록 NH<sub>3</sub>의 변환율이 높게 나타 나는 것을 확인할 수 있다. 이는 온도와 NH<sub>3</sub>의 생성이 관련이 있다는 것 을 보여준다. 화학 반응이 일어나기 위해서는 반응 물질의 입자들이 활성 화 에너지보다 높은 충분한 에너지를 가지고 있어야 한다. 화학 반응은 온 도가 높을수록 빨리 진행이 되며, 활성화 에너지보다 큰 운동 에너지를 가 지는 분자 수가 증가하기 때문이다.



Fig. 4-11 Calculated conversion ratio to NH<sub>3</sub> for gas temperature.

또한, DeNOx 촉매가 활성화되기 위해서는 기본적으로 촉매 표면에 환 원제인 NH<sub>3</sub>가 흡착되어야만 한다. 많은 인자들이 NH<sub>3</sub>의 촉매 흡착에 영향 을 주지만 가장 중요한 인자가 촉매의 표면 온도이다. 배기가스 온도가 낮 을 경우 촉매의 표면 온도도 낮기 때문에 NH<sub>3</sub>가 촉매 표면에 흡착하기가 어려워 결국 촉매 활성화를 위한 기본 조건이 형성되지 않아 NOx의 변환 효율이 떨어진다<sup>15)</sup>. 따라서 촉매에 대한 적절한 온도로 설정해야 한다.

SCR 시스템의 효율과 NH<sub>3</sub> 슬립을 고려하여 NH<sub>3</sub>의 변환율 기준은 85% 이상이 바람직하다. 현재 선박에서 많이 사용되고 있는 V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/TiO<sub>2</sub> 촉매의 활성 온도 범위가 250~450℃인 것을 고려하여, 85% 이상의 NH<sub>3</sub> 변환율이 나타나는 350℃ 이상의 배기가스 온도에서 SCR 시스템의 효율이 좋다고 볼 수 있다.

또한, Table 4-4를 보면, 촉매부 전단에서의 온도가 배기가스 온도보다 약 3℃정도 떨어졌음을 알 수 있다. 이는 요소 수용액이 배기관 내에 분사 된 후, 흡열 반응이 일어나기 때문이다.

대부분의 경우(ME 엔진) 온도 제어가 가능하기 때문에 온도를 높여줄 필요가 없으나, 2기통 캠식 엔진(cam type engine) 엔진의 경우 온도제어 가 불가능하기 때문에 150~300℃의 배기가스가 유입 될 수 있는 저부하 운전시에 배기관 내의 온도를 높여줄 수 있는 전열판이 요구 되며, 저온도 촉매의 연구가 필요하다고 생각한다.

#### 4.4 배기가스 속도에 따른 NH3의 변환율의 해석 결과

Fig. 4-12에서 배기가스의 유입 속도가 증가함에 따라 NH<sub>3</sub>의 변환율이 줄어드는 것을 확인 할 수 있다. 이는 배기관 내에서 요소 수용액이 머무 르는 시간과 NH<sub>3</sub>로 변환하는 반응시간이 짧아지기 때문이다. 또한 SCR 시스템의 전반적인 효율을 보게 되면 촉매부에서 NOx가 머무르는 시간이 줄어들게 되어 NH<sub>3</sub>와 반응할 수 있는 시간도 줄어들기 때문에 최종적인 NOx의 저감 효과도 떨어질 것으로 보인다.

NH<sub>3</sub>의 변환 효율은 온도가 속도보다 더 많은 영향을 끼치게 된다. 그러 나 배기가스가 저온도(300℃ 이하)인 경우 속도가 주요한 인자가 된다. 배 기가스의 유입 속도를 줄이기 위하여 배기관의 길이와 면적의 조절 등의 다양한 연구가 요구된다.

Туре	Vane type		Vertical type	
Velocity (m/s)	Conversion Ratio (%)	Uniformity (%)	Conversion Ratio (%)	Uniformity (%)
6	93.2	99.2	92.8	96.1
8	88.7	99.1	88.7	96.1
10	85.4	99.1	85.0	96.3

Table 4–4 Effect of velocity of  $NH_3$  conversion efficiency.



Fig. 4–12 Calculated conversion ratio to  $NH_3$  for gas velocity.

#### 5. 결 론

SCR 시스템의 믹서 형상에 따른 요소 수용액의 유동 혼합 해석 결과를 요약하면 다음과 같다.

1) 베인형 믹서의 난류운동에너지는 믹서가 없는 배기관보다 약 5배
 (497.5%) 높게 나타났다.

2) 베인형 믹서의 NH<sub>3</sub>의 변환율은 믹서가 없는 배기관보다 27.9%, 균일도
는 97.2% 증가하였다. 믹서를 추가하는 것이 NH<sub>3</sub> 변환율과 촉매부 전단에
서의 균일도가 더 좋다.

 레인형 믹서와 버티컬형 믹서의 NH<sub>3</sub>의 변환율의 차이는 0.2%, 난류운 동에너지의 차이는 19.2%로, 믹서 형상에 따른 유동 혼합 특성에 미치는 영향은 큰 차이가 없었다.

4) 믹서가 있는 경우, 요소 수용액의 분사 각도는 배기가스 유동 방향을 기준으로 상 방향 45°일 때 NH<sub>3</sub>의 변환율이 89.02%로 가장 컸으며, 균일 도는 15°일 때 52.54%로 가장 좋았다.

5) NH<sub>3</sub>의 변환 효율 및 촉매의 활성 온도를 고려하였을 때, 배기가스의 유 입 온도는 350℃ 이상이 되어야 85% 이상의 NH<sub>3</sub>의 변환율을 유지한다. 6) 배기가스의 속도가 빠를수록 NH<sub>3</sub>의 변환 효율이 떨어짐을 확인할 수
다. 또한, 촉매부에서의 반응이 줄어들게 됨으로 최종적으로 NOx의 저감
효율도 떨어질 것으로 생각된다.



#### 참고 문헌

 Matsuei Ueda and Yoshihiko Itoh (2004), A Concept of Plasma Assisted Catalyst System Using a De-NOx Catalyst for an Automobile Diesel Engine, SAE.

2) Koutarou Wakamoto and Toshihiko Nishiyama (2003), System Evaluation of the HC De-NOx Catalyst for Industrial Heavy-Duty Diesel Engine, SAE.

- 3) 김주연, 두병만 (2004), SCR 시스템의 요소용액 미립화 및 분해반응 예
   측, 한국자동차공학회 추계학술대회논문집, pp. 236~241.
- 4) 정용일, 윤재건 (2000), 자동차와 환경, 한성대학교 출판부 pp. 55~60.
- 5) 김남일 (2014), 디젤 배기관내 분사된 우레아 수용액의 증발 및 혼합특 성에 관한 연구, 석사학위논문, 전북대학교 대학원.
- 6) http://cafe.naver.com/mecha4222/4264
- 7) 김태경, 성연모, 한승한, 하상준, 최경민, 김덕줄 (2012), 선박용 SCR 시 스템에서 혼합기 구조에 따른 난류유동과 우레아 수용액의 혼합특성, 한 국마린엔지니어링학회지, 제36권 제6호, pp. 814~822.

- 8) MAN (2014), SCR의 원리와 구성, MAN Diesel school.
- 9) 송미지 (2013), Urea-SCR 시스템의 Diffuser 및 Mixer 형상 변경에 따 른 NH<sub>3</sub> 유동균일도에 관한 수치해석적 연구, 공학석사학위논문, 국민대 학교 자동차공학 전문대학원.
- W. Addy Majewski and Magdi K. Khair (2006), Diesel Emissions and Their Control, SAE International, pp. 418~426.
- 11) ANSYS. Inc. (2013), Fluent Theory Guide, pp. 47~53.
- 12) ANSYS. Inc. (2013), Fluent Theory Guide, p. 356.
- 13) ANSYS. Inc. (2013), Fluent Theory Guide, pp. 371~391.

14) Felix Birkhold, Ulrich Meingast, Peter Wassermann and Olaf Deutschmann (2006), Modeling ans simulation of the injection of urea-water-solution for automotive SCR DeNOx-systems, Science direct.

15) 박대식 (2009), 선택적 환원 촉매(SCR)에서 다양한 배기가스 조건에 따른 NOx 변환효율 및 환원제(NH<sub>3</sub>) 분사량 제어에 관한 실험적 연구, 석사학위논문, 국민대학교 공학대학원.