

<학술논문>

DOI <http://dx.doi.org/10.3795/KSME-B.2016.40.7.429>

ISSN 1226-4881(Print)

2288-5324(Online)

박용 탈질 시스템의 혼합기 적용에 따른 요소수용액 분무 및 혼합특성 수치적 연구 §

장 재 환* · 박 현 철**

* STX엔진주식회사 엔진기술연구소

Numerical Study on Urea Spraying and Mixing Characteristics with Application of Static Mixer in Marine SCR System

Jaehwan Jang* and Hyunchul Park**

* R&D Institute, STX Engine Co., Ltd.

(Received January 4, 2016 ; Received April 8, 2016 ; Accepted May 2, 2016)

Key Words: Thermolysis(열분해), Hydrolysis(가수분해), Uniformity Index(균일도)

초록: 중대형 출력의 해상용 디젤엔진에서 여러 탈질 기술 중 요소(Urea)를 환원제로 사용하는 Urea-SCR 시스템이 가장 검증된 기술로 알려져 있다. 요소수의 경우 Urea-SCR 시스템의 노즐 특성 및 혼합기 유·무에 의한 분무거동 및 혼합특성이 시스템 효율에 지대한 영향을 미친다. 따라서 본 연구는 SCR 시스템의 최적 설계를 위해 혼합기 적용에 따른 반응영역에서의 분무거동 특성 및 암모니아 균일도를 전산해석기법으로 분석하였다. 그 결과 혼합구간의 NH₃농도로 비취 볼 때 SCR 시스템의 성능 향상을 보장하기 위해서는 환원제의 균일도를 고려한 특정 형상의 혼합기의 적용이 필요하다는 것을 알 수 있었다. 특히 선박용 SCR 시스템은 설치 공간 제약에 따라 혼합구간 단축을 위해 혼합기 적용은 필수적임을 알 수 있었다.

Abstract: Among various De-NOx technologies, Urea-based Selective Catalytic Reduction (SCR) systems are known to be the most effective in marine diesel applications. The spraying and mixing behavior of the urea-water solution has a decisive effect on the system's net efficiency. Therefore, in this study, the spray behavior and ammonia uniformity with and without a static mixer were analyzed by CFD in order to optimize the SCR system. The results showed that the static mixer significantly affected the uniformity of velocity and ammonia concentration. Static mixers may be especially suited for marine SCR systems with space constraints.

- 기호설명 -

- γ : 균일도 지수
- i : 격자 지수
- n : 격자 수
- A : 격자면적(-i), 단면적(-ges)
- Φ : 매개변수 (NH₃농도, 유속, 유량)

1. 서 론

최근 선박에 의한 환경오염이 국제적 이슈로 부

상됨에 따라 국제해사기구(International Maritime Organization, IMO)에서는 2016년 1월 1일 이후 용골거치(Keel laying)되는 선박의 디젤엔진에 대해 질소산화물 규제지역(NOx Emission Control Area, NECA)운항 시 Tier 3를 적용한다.⁽¹⁾ De-NOx 기술에는 Urea-SCR, LNT, EGR 등 다양한 후처리 기술이 있으며, 이 중 요소(Urea)를 환원제로 사용하는 Urea-SCR 이 가장 효율적이며 적합한 기술로 평가되고 있다.⁽²⁾ 선박용 Urea-SCR 시스템의 경우 40% 농도의 수용액 형태로 되어 있는 요소(Urea)를 반응 영역 내에 분사함으로써 촉매를 거쳐 인체에 무해한 물과 질소로 전환시킨다. 특히 균일도(Uniformity Index, UI)는 Urea-SCR의 NOx 저감율

§ 이 논문은 2015년도 대한기계학회 경남지회 춘계학술대회(2015. 11. 27., KIMS) 발표논문임.

† Corresponding Author, big@kaist.ac.kr

© 2016 The Korean Society of Mechanical Engineers

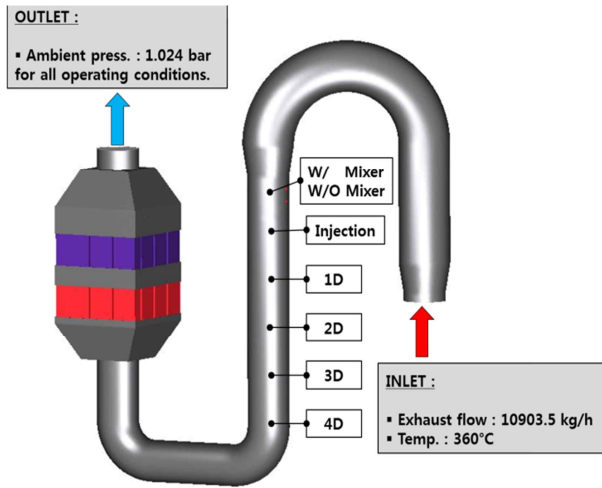


Fig. 1 Computational modeling of Urea-SCR

을 향상시키기 위한 주요 인자로서, 이를 위해서는 촉매층으로 유입되는 암모니아 농도 균일도(NH₃ Concentration Uniformity Index, 이하 NH₃ UI, 농도 균일도)와 유동의 유속 균일도(Flow Velocity Uniformity Index, 이하 Velocity UI, 유속 균일도)에 좌우되며, 최적화된 배기시스템의 설계에 따라 환원효율을 결정하는 중요한 요소가 된다.

따라서 본 연구에서는 2MW 급 Urea-SCR에 대하여 실제 시스템 성능에 영향을 미치는 인자를 전산해석기법을 통해 파악하고자 한다. 특히 Urea-SCR 시스템의 최적 설계를 위해 혼합기 유·무(W/mixer, W/O mixer)에 따른 시스템 전체 반응영역에서의 분무거동 특성을 분석하였으며, 특히 NO_x 저감효율 및 촉매 성능에 영향을 미칠 수 있는 촉매 유입부에서의 유동특성 및 균일도(Uniformity Index)에 대한 특성을 분석하여 설계 자료를 확보하고자 하였다.

2. 수치해석 모델링

2.1 수치해석 모델 및 경계조건

본 연구에서는 Urea-SCR System에서 혼합기(Mixer)의 유·무에 따른 Urea 수용액의 분무거동 및 배기가스와의 혼합특성을 파악하기 위해 유한체적법을 기반으로 하는 상용 CFD Code인 AVL FIRE v2014를 이용하였다. 수치해석을 위한 혼합기 모델은 당사에서 개발한 형상을 적용하였으며, 시스템 모델은 Pro/E에서 FIRE v2014으로 인식할 수 있도록 확장자 파일(*.stl)로 변환하여 적용하였다. 격자 생성은 FIRE의 FAME Hybrid Assistant 기능을 사용하여 Volume Mesh를 생성하였다.⁽³⁾ 격자

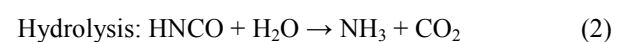
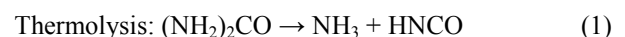
Table 1 Boundary conditions

Item	Value	Unit
Exhaust system	Inlet Mass flow	10903.5 Kg/h
	Outlet pressure	1.024 Bar
	Temperature	633.15 K
	Inlet velocity	30 m/s
	Inner diameter	500 mm
Wall	heat transfer coefficient	15.0 W/m ² ·K
	Environmental Temperature.	297.15 K
Wall Catalyst	Thermal conductivity	16.3 W/m·K
	Cell density(CPSI)	46 1/in ²
	Wall Thickness	24.016 mil
Catalyst	Washcoat Thickness	0.6100064 mil
	Type	Mineral wool -
	Thickness of insulation	50 mm
Insulation	Thermal conductivity	0.0442 W/m·K
	Specific heat	840 J/kg·K

수는 혼합기가 적용되지 않은 경우 약 900,000개, 혼합기가 장착된 경우에는 약 1,700,000개이고, 격자 타입은 Hexahedron(90%), Tetrahedron(10%)로 구성하였다. 난류 모델의 경우 일반적으로 $k-\epsilon$ 을 사용하지만 U자관 및 복잡한 형상의 혼합기를 포함하고 있어 시스템 특성 상 $k-\zeta-f$ 모델을 사용하였다. SCR 촉매 부분은 다공성 매질의 투과율 및 관성저항 특성을 갖는 Porous model을 사용하여 완전 발달된 층류가 적용되도록 하였으며, 촉매의 저항으로 발생하는 Pressure drop 를 구현하기 위해 Forchheimer 모델을 적용하였다. Urea-SCR 시스템의 경계조건은 Fig. 1 및 Table 1에서와 같이 배기시스템의 경우 실제 엔진에서 획득한 온도, 압력, 유량 데이터를 적용하였다.

2.2 Urea-SCR 메커니즘

요소수용액(40wt%)이 고온의 배기가스에 노출되면, 다음의 단계를 따라 NH₃가 생성된다.⁽⁴⁾



식 (1), (2)의 화학반응 메커니즘에서 보는 바와 같이 요소수용액의 물 증발과 동시에 Urea의 열해

Table 2 Injection conditions

Item	Value	Value	Unit
Urea Injection	Nozzle type	Single phase	-
	Number of nozzle hole	1	ea
	Tip hole size	3.0	mm
	Injection velocity	100	m/s
	Total mass flow rate	7.629	g/s
	Spray cone angle	15	°

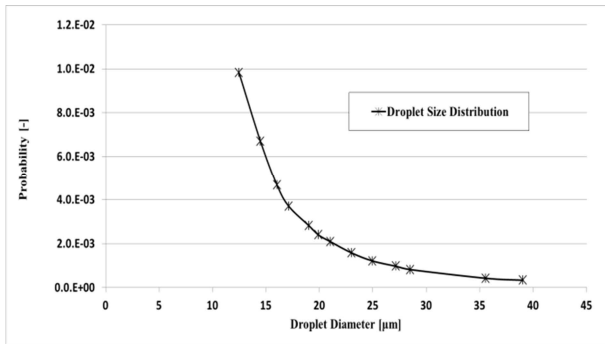


Fig. 2 Distribution of droplet size for injection

리(Thermolysis) 과정을 통해 암모니아(NH₃)와 이소시아나산(Iso-cyanic acid, HNCO)으로 분해된다. 이때 발생된 HNCO는 배기관의 반응영역을 따라 가수분해(Hydrolysis) 과정을 거쳐 암모니아로 전환된다. 따라서 화학반응 모델링은 Urea-SCR System 설계 시 중요한 파라미터로 간주된다.

2.3 분사모델

요소수용액의 분무거동 특성 모사를 해석하기 위해 FIRE에서 제공하는 Spray Module을 적용하였다. 해당 모듈의 경우 연속체 성격을 가지는 Euler 모델과 비연속적인 입자들의 거동을 추적하기 위한 Lagrange 모델을 포함하고 있으며, 특히 Multiple Fluid의 혼합특성 해석에 있어 더욱 정확한 예측이 가능한 Multi-Phase 모듈도 포함하고 있다.⁽⁵⁾ 또한 Urea-SCR 시스템의 액적의 거동을 예측하기 위해 Injection 타입(Single phase type)의 액적분포, 증발거리, SMD(Sauter Mean Diameter)는 제작사의 데이터를 적용하였으며, Fig. 2와 Table 2에 각각 인젝터의 정보와 액적분포를 상세히 나타내었다. Urea 액적 증발모델은 Birkhold 등의 이론으로 정의된 SCR-Thermolysis 모델을 사용하였으며, 열분해 모델링에 필요한 파라미터는 Birkhold가 제시한

값을 사용하였다.⁽⁶⁾ 열분해 과정을 거쳐 HNCO의 가수분해 과정은 균일가스 상 반응(General Gas Phase Reaction)을 이용한 CHEMKIN chemistry 반응 모델을 적용하였고, Urea 수용액 분사에 의한 벽면에서의 Wall film, Convection / Radiation을 고려하기 위해 Thin Wall이 적용되었다.⁽⁷⁾

2.4 균일도(Uniformity Index)

균일도는 SCR 시스템 성능을 평가하기 위한 지표로도 사용되는 중요한 설계지표이다. 이 지표는 Weltens⁽⁸⁾가 제안한 균일도 지수(Uniformity Index, γ)가 일반적으로 사용되고 있으며, 다음과 같이 정의한다.

$$\gamma = 1 - \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n \frac{A_i |\phi_i - \bar{\phi}|}{\bar{\phi} A_{ges}} \quad (3)$$

I : cell index

N : total number of cells

A : area (i - cell area, ges - cross sectional area)

Φ : considered value (velocity, NH₃, mass flow, etc.)

여기서 n 은 총 Cell의 개수, A_{ges} 와 A_i 는 축매의 단면적과 국부면적을 나타내며, Φ 는 유동관련 매개변수를 의미한다. 따라서 균일도 지수가 1에 가까워질수록 Φ 가 균일하다는 것을 의미하며, 이는 혼합특성 및 축매에서의 정화효율 결정에 매우 중요한 설계 인자가 된다.

3. 수치해석 결과

3.1 혼합기 유·무에 따른 SCR System 유동특성

Fig. 3은 혼합기 유·무에 따른 SCR 시스템 전체에 대한 유동특성 및 액적분포를 보여준다. W/Mixer의 경우, 혼합구간 내 강한 난류가 생성되는 것을 관찰할 수 있으며, Tangential 및 Swirl flow에 의한 Urea와 배기가스의 혼합율을 향상시켜 배기관 및 축매 내의 NH₃ 분포를 균일하게 한다.

또한 반응영역 내 체류시간을 증가시켜 Urea의 증발 및 NH₃로의 전환율을 향상시킨다. 하지만 Tangential 및 Swirl flow의 난류강도가 강할 경우 액적이 배관 벽면에 치우치는 현상이 발생하여 Urea deposit의 요인이 될 수 있으며, 이를 고려하여 벽면에 치우치지 않게 혼합기 설계를 요한다.⁽⁹⁾

W/O mixer의 경우, Diffuser 전단까지 내부 유동에 의한 저항이 없으므로 축 방향으로의 유선(Streamline)만 형성되는 것을 확인할 수 있다. 이러한 유동 특성은 Fig. 3(a)에서와 같이 Urea가 중

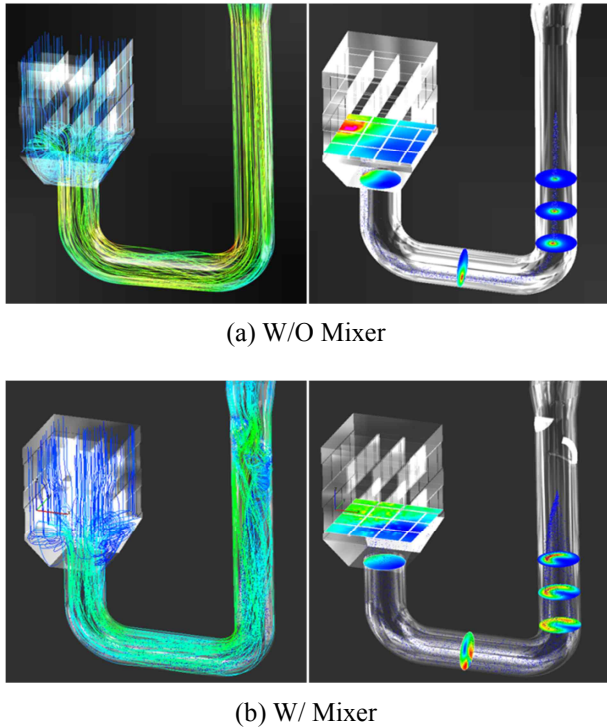


Fig. 3 Flow characteristics (left) and Urea distribution (right) in Urea-SCR system

상으로 집중되게 한다. 이는 배기가스와의 혼합특성이 저하됨으로써 증발 및 열분해 반응을 감소시킬 수 있으며, 촉매 전단까지 환원제가 편중됨으로써 정화효율 저하를 초래할 수 있다. SCR 반응기 영역 쪽에서의 유동 특성을 살펴 보면 Fig. 3(b)에서 나타나듯이 혼합기 유·무에 관계없이 두 case 모두 Diffuser의 형상과 촉매의 표면 저항으로 인한 유동 재순환 영역과 축 방향의 반대 방향 성분이 관찰되었다. 이러한 Diffuser와 배기관과의 면적 변화에 따른 급격한 유동확산은 촉매 전단부에서의 유속 균일도(Velocity UI)에 큰 영향을 미친다.

3.2 온도에 따른 NH₃ 전환율 특성

SCR System의 NH₃로의 전환을 살펴보기 위해 각 반응영역에서 평균온도에 따른 NH₃ 생성을 분석하였다. 먼저 Urea 분사에 의한 SCR 시스템 반응 영역에서의 온도 분포는 Fig. 4에서 보는 바와 같이 고온의 배기가스 온도(T_{inlet}: 360 °C 기준)에 노출될 경우 빠른 증발과 동시에 Urea의 열해리 과정을 통해 각 Case 모두 기준 배기가스 온도와 차이가 발생하는 것을 볼 수 있다. 특히 혼합기 적용 시 3.1절에서 언급하였듯이 분사된 환원제가 강한 난류에 의해 넓은 영역에서 증발 및 열분해가 일어남에 따라 혼합구간의 1D 지점에서 약 15도의 온도차이가 발생하는 것을 확인할 수 있

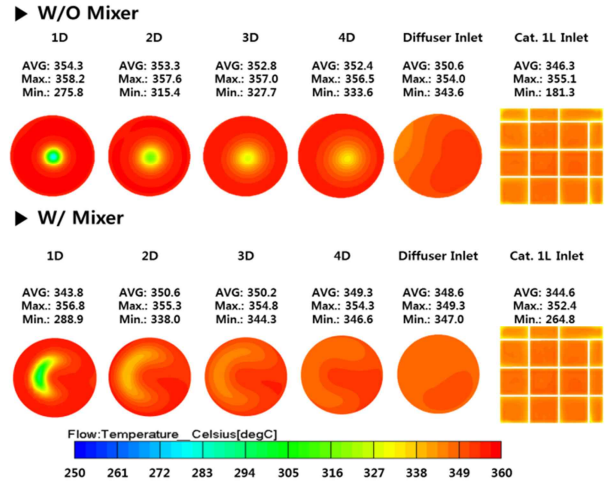


Fig. 4 Distribution of mean temperature with and without mixer

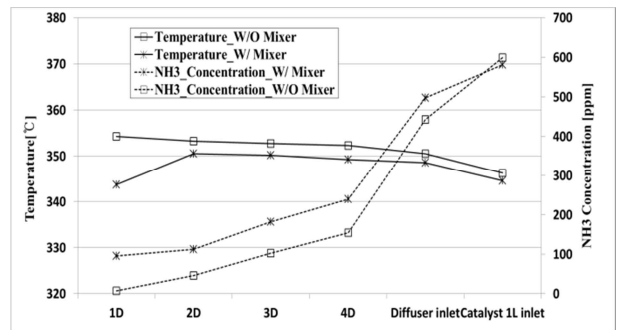


Fig. 5 Comparison of mean temperature and NH₃ concentration with and without mixer

다. 이는 초기 분사 시 요소수용액이 확산될 때 반응 영역에서 급격한 온도차이로 인해 액적에서의 물 증발이 신속히 이루어져 보다 빠른 열분해 반응을 일으키게 된다. 하지만 Fig. 5에서와 같이 촉매전단에 가까워짐에 따라 두 Case 모두 유사한 NH₃를 생성한다는 것을 알 수 있었다. 이와 같은 수렴성을 보이는 이유는 촉매전단까지의 혼합거리가 늘어남에 따라 온도의 감소폭이 점점 완만해져 결과적으로 촉매 전단(Catalyst 1L inlet)에서 유사한 NH₃ 생성율을 보인다고 할 수 있다.

3.3 혼합기 유·무에 따른 농도 균일도 특성

혼합기 유·무에 따른 농도 균일도(NH₃ UI) 특성은 Fig. 6과 Fig. 7에서 보는 바와 같다. 혼합기를 적용한 경우 Tangential 및 Swirl Flow의 강한 난류로 인해 배기가스와 Urea의 혼합이 활발하게 이루어져 농도 균일도가 혼합기를 적용하지 않은 경우에 비해 약 25% 향상 됨을 확인할 수 있다. 이와 반대로 혼합기를 적용하지 않을 경우 Fig. 6에서

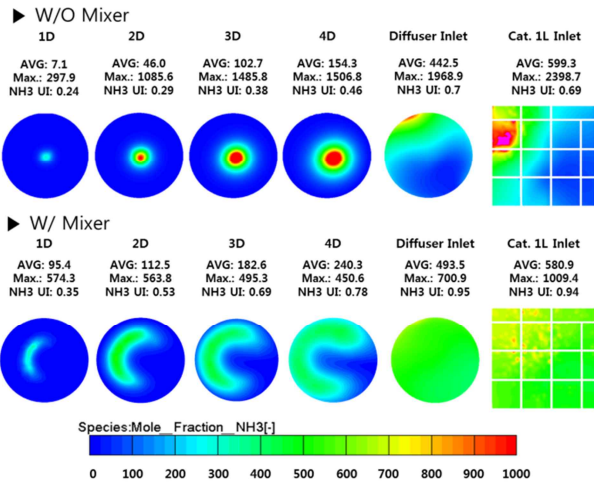


Fig. 6 Distribution of NH₃ concentration with and without mixer

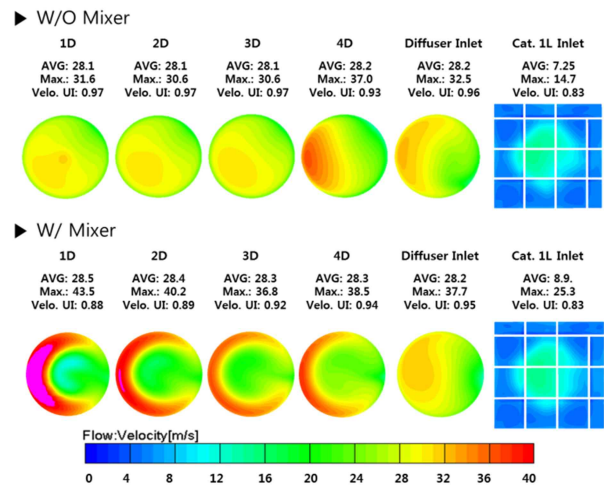


Fig. 8 Distribution of mean velocity with and without mixer

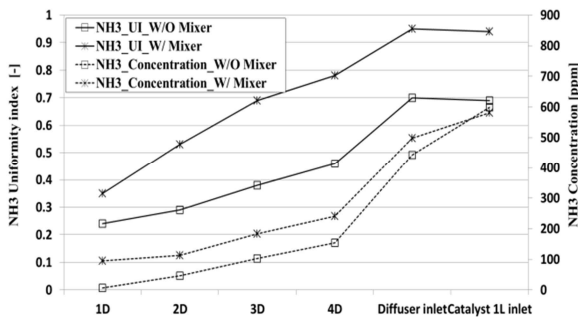


Fig. 7 Comparison of NH₃ UI and Concentration with and without mixer

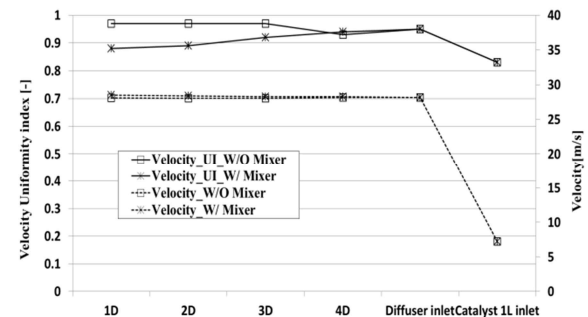


Fig. 9 Comparison of Velocity UI and mean velocity with and without mixer

보는 바와 같이 혼합기에 의한 강한 난류의 영향 없이 축 방향으로의 속도만 반영되어 SCR 시스템 반응영역에서 혼합이 원활하게 이루어지지 않음을 알 수 있다.

또한 요소수의 분사전단 곡관에 의한 배기 유속 차로 인해 분사 후 액적분포가 중앙에서 좌측 상단으로 일정량 치우치는 경향이 나타나며, 이후 다시 두 차례의 곡관을 통과하면서 유동의 관성에 의해 Diffuser 중심을 기준으로 편향된 상태로 촉매에 유입된다. 그 결과 촉매전단에서의 농도 균일도가 69%로 현저히 떨어짐을 알 수 있다. 농도 균일도가 떨어지면 NO_x / NH₃의 비율이 맞지 않아 국부적으로 환원제가 편중되게 된다. 따라서 적정량의 환원제를 분사하더라도 정화효율은 감소함을 알 수 있으며 환원제 분사량 대비 효율도 저하됨을 알 수 있다.

3.4 혼합기 유·무에 따른 유속 균일도 특성

Fig. 8과 Fig. 9에서는 속도에 따른 유동에 관한

균일도를 파악하고자 하였다. 혼합기 미적용의 경우 Fig. 8에서 살펴보면 혼합기에 의한 유동저항이 없으므로 혼합구간(1D~3D)에서의 유속 편차가 발생하지 않아 98% 수준의 높은 유속 균일도를 보인다. 반면 혼합기를 적용한 경우 혼합구간 내 Tangential 및 Swirl flow에 의한 영향으로 단면에서의 유속 편차가 발생하게 되며 균일도 저하에 영향을 미치는 것을 확인할 수 있었다. 두 Case 모두 배관의 곡관부를 통과하면서 Diffuser Inlet 전단까지의 충분한 길이에 의해 유동이 완전 발달됨에 따라 유속 균일도는 Fig. 8에서 보는 바와 같이 95%까지 향상되나, 모두 급속 확대관(Diffuser)이라는 형상변화(배관: 원형, Diffuser: 사각형)에 의한 각 모서리부의 유동박리 및 유동재순환이 발생하여 약 83%까지 균일도 저하를 유발시킴을 알 수 있다.

3.5 결과

Diffuser의 형상학적인 특징으로 인해 유동재순환 및 축 방향 반대방향의 유동성분이 촉매 입구

에서의 유속 균일도를 저해시키는 요인으로 작용함을 확인하였다. 또한, 각 Case 모두 촉매전단에 가까워 질수록 배기가스 온도의 감소폭이 점점 완만해지는 것을 볼 수 있으며, 결과적으로 NH₃ Mole Fraction은 온도의 감소폭이 완만해짐에 따라 거의 유사한 NH₃ 생성 볼 수 있으나, 농도 균일도가 떨어지면 국부적으로 NO_x / NH₃의 비율이 맞지 않아 환원제의 분포 편중이 발생할 경우 적절한 환원제를 분사하더라도 정화효율은 감소함을 알 수 있었다. 따라서, 혼합기 적용 시 단면에서의 유속 편차로 인해 혼합구간 내에서 유속 균일도 저하에 영향을 미칠 수 있으나, Tangential 및 Swirl Flow 의 강한 난류로 인해 배기가스와 Urea의 혼합이 활발하게 이루어져 촉매전단에서의 농도 균일도가 향상될 뿐 아니라 정화효율에도 큰 영향을 미치는 것으로 판단된다.

4. 결 론

혼합구간(1-3D)의 NH₃농도로 비춰 볼 때 SCR 시스템의 성능 향상을 보장하기 위해서는 환원제의 균일도를 고려한 특정 형상의 혼합기의 적용이 필요하다는 것을 알 수 있다. 특히 선박용 SCR 시스템은 육상용 SCR 시스템에 비해 기관실의 내부 구조 특성 상 설치 공간 제약이 따른다. 이에 따라 SCR 반응기까지의 폐기관 길이가 제한적일 경우 즉, 혼합구간이 짧아지는 경우에는 혼합기 적용이 필수적이다. 또한 유속 균일도는 혼합기 유·무에 관계 없이 Diffuser 형상에 지배적으로 큰 영향을 받는 것을 확인할 수 있다. 따라서 정화효율을 높이기 위해서는 촉매 반응영역에서의 NO_x / NH₃ 비율을 고려하여 Diffuser의 각도 및 길이를 설계해야 한다. 이에 따라 Diffuser 형상 변화 및 공간, 비용을 고려한 최적화된 설계가 필요할 것으로 판단되며 추후 Diffuser의 설계 변수를 설정하여 보다 상세한 분석을 진행할 예정이다.

후 기

본 연구는 STX 엔진주식회사의 EQ1R008에 의해 수행되었음.(No. EQ1R008)

참고문헌 (References)

- (1) Nishioka, A., Sukegawa, Y., Mukai, T., Katogi, K., Yokota, H., Mamada, H. and Kowatari, T., "A Study of a New After-treatment System(2) : Control of Urea Solution Spray for Urea-SCR," *SAE* 2006-01-0644, 2006.
- (2) Keobel, M., Elsener, M. and Marti, T., 1996, "NO_x-Reduction in Diesel Exhaust Gas with Urea and Selective Catalytic Reduction," *Comb. Sci. and Techn.*, 121: 85~102.
- (3) AVL FIRE 2014 USER GUIDE, "FIRE CFD Solver."
- (4) Koebel, M., Elsener, M. and Kleemann, M., 2000, "Urea-SCR: A Promising Technique to Reduce NO_x Emissions from Automotive Diesel Engines," *Catalysis Today*, Vol. 59, pp. 335~345.
- (5) AVL Fire 2014 User Guide, "Fire CFD_Solver_v.2014 Lagrangia Multiphase."
- (6) Birkhold, F., Meingast, U., Wassermann, P., and Deutschmann, O., 2007, "Modeling and Simulation of the Injection of Urea-Water-Solution for Automotive SCR DeNO_x-Systems," *Appl. Catal. B: Environ.*, 70, pp. 119~127.
- (7) Kee, R. J., Rupley, F. M., Meeks, E. and Miller, J. A., 1996, "Chemkin III: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical and Plasma Kinetics," *Sandia National Laboratories*, Livermore, CA 94551-0969.
- (8) Weltens, H., Bressler, H., Terres, F., Neumaier, H. and Rammoser, D., "Optimisation of Catalytic Converter Gas Flow Itribution by CFD Prediction," *SAE* 930780.
- (9) Bernhard, A. M., "Catalytic Urea Decomposition, Side-reactions and Urea Evaporation in the Selective Catalytic Reduction of NO_x," *Ph.D. Dissertation*, ETH, Zurich, Switzerland, 2012; Thesis 20813.