

JFMSE, 31(5), pp. 1417~1423, 2019. 수산해양교육연구, 제31권 제5호, 통권101호, 2019.

# SCR 시스템의 믹서 및 요소 수용액 분사각도가 유동 혼합에 미치는 영향

전혜진·공경주\*·정태영† 부경대학교(연구원)·\*부경대학교(학생)·†부경대학교(교수)

# Effect of Mixer and Urea-water-solution Injection Angle on Flow Mixing in SCR Systems

Hye-Jin JUN · Kyeong-Ju KONG\* · Tae-Young JEONG\*

Pukyong National University(researcher) · \*Pukyong National University(student) · \*Pukyong National University(professor)

#### Abstract

For efficient reduction of nitrogen oxides in selective catalytic reduction systems, the injected urea water solution must be converted almost 100% to ammonia for a short time. This paper presented the effects of mixer configuration on the urea water solution evaporation and mixing process in a selective catalytic reduction system, using numerical analysis tool of ANSYS FLUENT R15.0. The results of numerical analysis were compared to experimental results for verifying the numerical reliability. Compared to the case without the mixer, in case of the vane type mixer was installed, the conversion rate of  $NH_3$  increased by 21.4% and uniformity by 48.9%. In addition, when the injection angle of the urea-water-solution was  $45^{\circ}$  based on the exhaust gas flow direction, the conversion rate of  $NH_3$  was highest as 89.0%, and the uniformity was highest as 52.5% at 15°. In this study, proposed a method to convert urea solution rapidly, and it is expected that this results could be used to reduce ammonia slip in SCR systems.

Key words : Selective catalytic reduction, Mixer, Urea-water-solution, Injection angle, Numerical analysis

# I. 서 론

질소산화물(nitrogen oxide, NOx)은 디젤엔진의 배출가스 중 하나로, 고온의 연소 과정에서 공기 중의 질소가 산화되어 발생한다. 이는 호흡기 질 환의 원인이 되어 인체에 유해하고, 물과 반응하 여 산성비와 같은 환경오염의 주요 원인인 질산 (nitric acid)을 생성한다.

IMO(International Maritime Organization)에서는 선박에서 배출되는 NOx의 배출량 규제를 강화하 고 있으며, 2016년 1월 1일부터 배출규제해역에 서 NOx의 배출 규제를 위한 TierIII가 시행되었 다. TierIII는 Tier I을 기준으로 약 80%의 질소산 화물 배출량을 저감하도록 규정하였고, 이에 대 응하기 위하여 후처리 시스템에 대한 연구가 활 발히 이루어지고 있다(Azzara et al., 2014).

본 연구에서는 요소 수용액(urea water solution, UWS)을 사용한 Urea-선택적 촉매 환원법 (urea-selective catalytic reduction, Urea-SCR)에 대 해서 다루고 있다. 요소 수용액은 고체인 요소와

<sup>\*</sup> Corresponding author : 051-629-5998, tyjeong@pknu.ac.kr/orcid/org/0000-0002-1151-263X

액체인 물(water, H<sub>2</sub>O)를 혼합한 것이며, 인젝터 (injector)를 통해 배기관 내부로 분사가 된다. SCR 시스템의 촉매부 전단에서는 이 요소 수용 액이 암모니아(ammonia, NH<sub>3</sub>)로 짧은 시간동안 100% 변환 되어야 하며 이를 위해서는 인젝터의 분사 상태 및 요소 수용액의 혼합을 고려하여 빠 르게 변환 시킬 수 있는 방법이 필요하다. SCR 촉매부 전단에서 발생하는 주요 반응은 요소 수 용액이 액적 미립화 상태에서 고온의 배기가스와 혼합되면서 액상의 H<sub>2</sub>O가 기화되는 가수분해 반 응을 통해 요소가 수증기로 분리되는 반응이 다. 이후 남아있는 순수 요소는 열분해반응으로 NH<sub>3</sub> 와 HNCO (isocyanic acid, 이소시안산)으로 분리 되며, HNCO는 배기가스에 포함된 수증기와 다시 반응하여 NH<sub>3</sub>가 된다(Baik et al., 2004).

SCR 시스템의 환원제인 NH<sub>3</sub>는 인젝터를 통해 배기관으로 분무된 요소 수용액의 가수분해 및 열분해반응으로 생성되기 때문에 SCR 시스템의 요구에 따라 모두 변환되는 것이 이상적이다. 따 라서 NH<sub>3</sub>의 변환율은 Urea-SCR 시스템의 설계에 있어서 효율에 영향을 주는 주요한 인자이다. 또 한, NH<sub>3</sub>가 SCR 촉매부 전단에 고르게 분포하면 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(Koebel et al., 2000).

본 연구에서는 ANSYS FLUENT R15.0을 이용 하여 계산된 값을 검증하고, SCR 시스템의 믹서 의 형상과 요소 수용액의 분사각도에 따른 요소 수용액의 증발 및 유동 혼합을 수치해석하여 효 율을 분석하고 고찰하였다.

## Ⅱ. 재료 및 방법

1. 이론 해석

가. 화학 반응식

순수 무수 NH<sub>3</sub>는 SCR 시스템에서 환원제로 사용되어 왔다. 그러나 순수 무수 NH<sub>3</sub>는 높은 압 력에서 폭발 위험성이 있어 보관과 이동이 용이 하지 않으며, 인체에 유해하다는 단점이 있다. 이 에 비해 요소 수용액은 안전하고 다루기 쉬우며 독성이 없어 위험성이 적다. 요소 수용액은 엔진 배기부에서 촉매부 전단까지 인젝터를 통해 분사 가 되며, 식(1)~(3)과 같은 반응을 통해 분해가 된 다. 요소 수용액의 분해가 끝나면 최종적으로 NH<sub>3</sub>를 생성한다. 이러한 반응을 통해 생성된 NH<sub>3</sub>는 NO와 반응하여 N<sub>2</sub>와 H<sub>2</sub>O로 환원한다 (Döring et al., 2000).

 $\begin{array}{l} \operatorname{CO}(\mathrm{NH}_2)_2(\mathrm{aq}) & & & \cdots \\ \rightarrow \operatorname{CO}(\mathrm{NH}_2)_2(\mathrm{s} \text{ or } l) + 6.9\mathrm{H}_2\mathrm{O}(\mathrm{g}) \\ \\ \operatorname{CO}(\mathrm{NH}_2)_2(\mathrm{s} \text{ or } l) \rightarrow \mathrm{NH}_3(\mathrm{g}) + \mathrm{HNCO}(\mathrm{g}) & & \cdots (2) \\ \\ \mathrm{HNCO}(\mathrm{g}) + \mathrm{H}_2\mathrm{O}(\mathrm{g}) \rightarrow \mathrm{NH}_3(\mathrm{g}) + \mathrm{CO}_2(\mathrm{g}) & & \cdots (3) \end{array}$ 

#### 나. SCR 촉매

촉매의 활성도는 운전 조건이나 화학적인 요인 에 의해 낮아지기 때문에 운전 조건 및 상황에 맞는 촉매를 선택하여 사용해야 한다. 특히 배기 가스 온도가 저하되면 NH<sub>3</sub> 흡착 성능이 떨어지 기 때문에 이에 대한 개발이 많이 이루어지고 있 다. 촉매의 사용 온도 범위를 구분하면, 저온 촉 매는 160~300℃, 중온 촉매는 280~420℃, 고온 촉 매는 350~450℃ 이다. 저온용 및 고온용 촉매로 바나디아/티타니아(vanadia/titania) 촉매가 개발되 었으며 현재 SCR 촉매로 가장 많이 사용되고 있 다(Majewski and Khair, 2006).

#### 2. 수치해석

가. 수치해석 기법

배기관에 분사되는 요소 수용액의 증발 및 혼 합 특성에 대해 알아보기 위해 ANSYS FLUENT R15.0을 사용하여 수치해석 하였다. 입자의 분포 거동을 해석하기 위해, 연속체의 성격이 뚜렷한 주변의 기체 유동장에 대해서는 오일러(Euler) 관 점으로, 비연속적인 입자들의 거동 특성을 가지 는 요소 수용액의 분무 입자들은 라그랑지안 (Lagrangian) 관점으로 수치해석 하였다(ANSYS, Inc., 2013). 난류 모델은 realizable k-ε 모델을 사 용하였으며, k는 난류운동에너지, ε은 난류 소산 율을 나타낸다. 벽함수(wall function)는 측정 가능 한 벽함수(scalable wall function)를 적용하였다. 측정 가능한 벽함수는 벽 인근 격자가 재배열 (refinement) 되는 모순을 피하기 위해 사용되었 다. 벽면에서의 유동을 분석하기 위해 벽막 모델 을 사용하였으며, 액막은 다성분 입자 모델을 사 용하여 요소 수용액을 설정하였다.

#### 나. CFD 모델링

[Fig. 1]은 수치해석에 사용된 배기관의 형상을 나타낸 것이다. SCR 시스템에서 인젝터를 통해 분사되는 요소 수용액의 분사 조건에 따른 NH<sub>3</sub> 의 변환율을 비교하기 위해 배기관의 형상을 단 순화하여 원통형으로 수치해석 하였다. 배기관의 총 길이는 6.2 m이며 내경은 0.3 m이다. 인젝터 는 배기관 왼쪽 끝단에서 0.2 m 떨어진 곳에 위 치하였으며, 요소 수용액은 오른쪽 끝단 방향으 로 분산된다. 믹서의 위치는 왼쪽 끝단에서 0.7 m 떨어진 곳에 위치하고 있다.



[Fig. 1] CFD modeling for SCR system.

다. 수치해석 조건

조건에 따른 NH<sub>3</sub> 변환율(actual NH<sub>3</sub> formation (kmol)/theoretical NH<sub>3</sub> formation(kmol))을 비교해보 기 위해 변수를 믹서의 형상과 요소 수용액의 분 사 각도로 하였다. 각각에 대한 조건은 다음과 같다.

1) 믹서 형상

믹서 형상의 변수는 3가지이며, 믹서를 설치하 지 않은 배기관, 베인형 믹서(vane type mixer), 버 티컬형 믹서(vertical type mixer)이다.

[Fig. 2]는 믹서의 형상을 나타낸 것이며, (a)는 베인형 믹서, (b)는 버티컬형 믹서이다.



(a) vane type mixer (b) vertical type mixer [Fig. 2] Shape of mixer for CFD.

<Table 1>은 해석 조건을 나타낸 것으로, 배기 가스의 유속은 6 m/s, 온도는 400℃로 유입되며, 요소 수용액은 인젝터를 통해 10.6 m/s로 분사가 되도록 하였다.

<Table 1> 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

2) 요소 수용액의 분사 각도

요소 수용액의 분사각도를 6가지로 하여 각 믹 서 형상에 따라 수치해석 하였다. 다른 해석조건 들은 동일하며, 배기가스 유동방향 및 반대 유동 방향으로 각각 상 방향 0°, 15° 및 45°로 분사하 여 수치해석 하였다.

#### 3. 수치해석 신뢰성 검증

실제 실험 장치를 구성하여 신뢰성 검증을 진 행하기에는 비용과 시간 등의 제약이 많았다. 그 렇기 때문에 선행 연구된 실험논문을 참고하여 신뢰성 검증을 하였다(Birkhold et al., 2007). 본 연구에서 모델링 및 해석 조건은 신뢰성 검증에 참고된 논문과 동일하게 하였다. 참고된 논문에 서 NH<sub>3</sub>의 변환율 측정 위치는 인젝터를 기준으 로 오른쪽 방향으로 3 m, 4.5 m 와 6 m에서 측 정하였다. 각각의 측정 위치에서 0.3~1.0 sec의 체 류시간에 대하여 NH<sub>3</sub>의 변환율을 측정하였고, 이 를 동일하게 수치해석하여 비교하였다. [Fig. 3]은 참고 논문과 본 연구의 수치해석 결과를 비교한 것이다. 유속 및 온도의 조건에 따라 비교해본 결과 각각 0.77%, 2.89% 오차를 나타내며 유사하 게 나타났다.



[Fig. 3] Calculated conversion ratio of NH<sub>3</sub> for different gas velocities & temperatures compared to experimental data of Birkhold et al.(2007).

### Ⅲ. 결과 및 고찰

믹서가 없는 배기관, 믹서의 형상 그리고 요소 수용액 분사 각도에 따른 NH<sub>3</sub>의 변환율과 균일 도에 대해 수치해석하고 그 결과를 고찰하였다.

### 1. 믹서가 없는 배기관의 결과

[Fig. 4]는 믹서가 없는 배기관을 X-Y 평면을 기준으로 하여 중앙을 자른 단면이며, 각 물질의 농도 분포와 온도 분포를 나타낸 것이다.



[Fig. 4] Contours of mass fraction and temperature of none mixer pipe at X-Y plane.

요소 수용액이 배기가스 유동방향을 따라 분사 되고 있으며, NH<sub>3</sub>는 인젝터 부근에서 가장 많이 생성되었다. H<sub>2</sub>O와 HNCO의 분포가 점차 줄어드 는 것은 식(3)과 같은 반응 때문이며, 최종적으로 NH<sub>3</sub>가 생성된다. 또한, 온도 분포를 보게 되면, 흡열 반응이 일어난 것을 확인할 수 있다.

[Fig. 5]와 [Fig. 6]은 배기관을 Y-Z 단면으로 잘랐을 때의 수치해석 결과이다. [Fig. 5]는 단면 의 측정 위치를 나타내며, [Fig. 6]은 각 물질의 농도를 나타낸다. [Fig. 5]에서 1번 위치는 배기관 입구에서부터 0.2 m 떨어진 인젝터의 분사면의 단면이며, 2번 위치는 배기관 입구에서부터 1.2

m 떨어진 곳, 3번 위치는 3.2 m 떨어진 곳이며 4 번 위치는 SCR 촉매부 전단면을 나타낸다.



[Fig. 5] Measurement positions.



[Fig. 6] Contours of mass fraction.

#### 2. 믹서의 형상에 따른 결과

<Table 2>는 믹서 형상에 따른 촉매부 전단에 서의 NH<sub>3</sub> 변환율과 균일도 및 배기관 내에서의 난류운동에너지를 나타낸 것이다. 베인형 믹서의 NH<sub>3</sub>의 변환율이 믹서가 없는 배기관보다 21.4% 증가 하였으며, 균일도는 48.9% 증가하였다. 또한 베인형 믹서의 난류운동에너지가 믹서가 없는 배 기관보다 0.493 J/kg (497.5%) 증가하였다.

Mixer type	Conversion ratio (%)	Uniformity (%)	Turbulence kinetic energy (J/kg)
none	76.8	50.3	0.0991
vane	98.2	99.2	0.5921
vertical	98.0	96.6	0.4969

<Table 2> Effect of mixer type on NH<sub>3</sub> conversion ratio, NH<sub>3</sub> uniformity and turbulence kinetic energy

유체가 믹서를 지나면서 날개 방향으로 혼합이 되어 와류를 발생시키고, 믹서를 지난 유체는 유 동의 흐름에 영향을 받아 혼합되어 NH<sub>3</sub>의 생성 에 영향을 주는 것을 알 수 있다.

[Fig. 7]은 촉매부 전단에서의 NH<sub>3</sub>의 농도 분포 를 나타낸 것이다. (a)는 베인형 믹서, (b)는 버티 컬형 믹서이다. 균일도는 차이가 없으나 NH<sub>3</sub>의 농도 분포가 베인형 믹서는 단면부의 중앙부에, 버티컬형 믹서는 상부 쪽으로 위치하고 있다. 믹 서의 형상에 따라 농도 분포가 다르게 나타나며, SCR의 적용 상황에 따라 믹서의 형상을 결정하 면 효율적으로 이용할 수 있을 것으로 생각된다.



[Fig. 7] Contours of NH<sub>3</sub> mass fraction at SCR catalyst area.

[Fig. 8]은 믹서가 없는 배기관, 베인형 믹서, 버티컬형 믹서의 난류운동에너지와 NH<sub>3</sub>의 변환 율에 대해 나타낸 것이다. X축은 배기관 입구에 서부터 거리를 0.1 m 간격으로 측정하여 나타낸 것이며, Y축은 그 위치에서의 난류운동에너지와 NH<sub>3</sub>의 변환율을 나타낸다. 믹서가 없는 배기관의 경우 난류운동에너지의 변화가 거의 없지만, 베 인형 믹서와 버티컬형 믹서가 0.7 m에서 난류운 동에너지가 급격하게 증가하였다. 이는 0.7 m의 위치에 있는 믹서를 지나면서 난류가 발생했기 때문이다. 이에 따라 0.9 m의 위치에서 NH<sub>3</sub>의 생 성량이 급격하게 증가하였고, 난류운동에너지의 증가와 관련이 있다는 것을 확인할 수 있다.



[Fig. 8] Comparison of turbulent kinetic energy and NH<sub>3</sub> conversion ratio for mixer type.

#### 3. 요소 수용액 분사 각도에 따른 결과

믹서의 형상에 따른 수치해석과는 다르게, 분 사 각도에 따른 수치해석은 수직 방향의 분사 각 도가 변수이기 때문에 중력 가속도에 대한 경계 조건을 추가하였다. <Table 3>은 믹서가 없는 배 기관에서 요소 수용액의 분사 각도에 따른 NH<sub>3</sub> 변환율과 촉매부 전단에서의 균일도이다. 요소 수용액을 배기가스 유동방향으로 분사하였을 경 우에 비해 배기가스 유동방향과 반대로 분사할 경우, 배기관 내에서의 체류시간이 길어 배기관 하단부로 쌓이는 요소가 증가하고 그만큼 변환 효율이 떨어짐을 알 수 있다.

또한 분사각도가 배기가스 유동 방향을 기준으 로 상 방향으로 15°에 비해 45°일 경우 변환율이 크게 나타났다. 생성된 NH<sub>3</sub>는 중력의 작용으로 인해 배기관 하단 쪽으로 이동하게 되며, 분사각 도를 배기가스 유동 방향을 기준으로 상 방향으 로 설정하게 되면 같은 시간동안 배기관 하단에 쌓이는 요소 수용액의 양이 적어져 NH<sub>3</sub>의 변환 율이 좋은 것으로 생각된다. 또한, 각도가 너무 커지게 되면 월 웨팅(wall wetting) 현상이 일어나 게 되므로 45° 이상으로 할 경우 변환율이 저하 될 것으로 예측된다(Strots et al., 2010).

<Table 3> Conversion ratio and uniformity according to injection angle

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

#### Ⅳ. 결 론

믹서 및 요소 수용액 분사각도가 SCR 시스템 의 유동 혼합에 미치는 영향을 알아보기 위해 유 동해석 하였고, 그 결과를 요약하면 다음과 같다. (1) 믹서를 추가하는 것이 NH<sub>3</sub> 변환율과 촉매 부 전단에서의 균일도가 높게 나타났다. 특히 베 인형 믹서를 추가하는 경우 믹서가 없는 배기관 보다 NH<sub>3</sub> 변환율은 21.4%, 균일도는 48.9%, 난류 운동에너지는 약 5배(497.5%) 높게 나타났다.

(2) 베인형 믹서와 버티컬형 믹서를 비교해보
면, NH<sub>3</sub>의 변환율은 0.2%, 균일도는 2.6% 차이로
두 가지 믹서의 형상 차이가 유동 혼합 특성에
큰 영향을 미치지 못했다.

(3) 믹서가 없는 경우, 요소 수용액의 분사 각 도가 배기가스 유동방향을 기준으로 상 방향 45° 일 때 NH<sub>3</sub>의 변환율이 89.0%로 가장 높았으며, 균일도는 15°일 때 52.5%로 가장 높게 나타났다.

### References

- ANSYS, Inc.(2013). ANSYS Fluent Theory Guide. 47~53, 371~391.
- Azzara A, Rutherford D and Wang H(2014). Feasibility of IMO Annex VI Tier III Implementation Using Selective Catalytic Reduction. ICCT. Working Paper 2014-4. 1~9.
- Baik JH, Yim SD, Nam IS, Mok YS, Lee JH, Cho BK and Oh SH(2004). Control of NOx emissions from diesel engine by selective catalytic reduction (SCR) with urea. Topics in Catalysis, 30(1-4), 37~41.
- Birkhold F, Meingast U, Wassermann P and Deutschmann O(2007). Modeling and simulation of the injection of urea-water-solution for automotive SCR DeNOx-systems. Environmental, 70(1-4), 119~127.

https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2005.12.035

- Döring A, Bugsch M, Hetzer J, Bader I, Struckmeier D, Baydak M, Losher R and Stiesch G(2017). The MAN SCR System - More Than Just Fulfilling IMO Tier III. SIMAN Conference, 1~10.
- Koebel M, Elsener M and Kleemann M(2000). Urea-SCR: a promising technique to reduce NOx emissions from automotive diesel engines. Catalysis Today, 59(3-4), 335~345.

https://doi.org/10.1016/s0920-5861(00)00299-6

- Majewski WA and Khair MK(2006). Diesel emissions and their control. SAE international, 418~426.
- Strots VO, Sanathanam S, Adelman BJ, Griffin GA and Derybowski EM(2010). Deposit formation in Urea-SCR Systems. SAE International, 2(2), 283~289. https://doi.org/10.4271/2009-01-2780
- Received : 30 August, 2019
- Revised : 26 September, 2019
- Accepted : 04 October, 2019