

시뮬레이션을 이용한 암모니아, 에탄올, 노말데케인 분무 특성 비교

이재진* · 염은섭†

Comparison of spray characteristics for ammonia, ethanol, n-decane by using numerical simulation

Jaejin Lee* and Eunseop Yeom†

Abstract Due to increasingly strict emission regulations for carbon-based fuels in the shipping industry, there is a significant motivation to investigate the alternative fuel. Ammonia is one of the attractive alternative fuels as a carbon-free fuel. Since ammonia has different properties such as high vapor pressure and low boiling point compared to conventional fuels, further research into ammonia spray behavior is important. In this work, the spray characteristics of ammonia and other fluids (ethanol, n-decane) were compared by using numerical simulation. The results show that the spray characteristics of ammonia differs from those of the others due to the occurrence of flash boiling. The narrow-dispersed spray with accelerated velocity at the center have been observed for ammonia. It is also found that droplets of ammonia achieve smaller diameter with more uniform distribution, leading to better atomization behavior compared to the others.

Key Words : Ammonia(암모니아), CFD(전산유체역학), Spray characteristics(분무 특성), Flash-boiling(감압 비등)

기호설명

ρ Air density (kg/m^3)
 ρ_p Particle density (kg/m^3)
 $c_{p,\infty}$ Heat capacity of the air ($\text{J/kg}\cdot\text{K}$)
 c_p Heat capacity of the particle ($\text{J/kg}\cdot\text{K}$)
 m_p Particle mass (kg)
 H Enthalpy (J/kg)
 h_{fg} Latent heat (J/kg)

T_∞ Air temperature (K)
 T_p Particle temperature (K)
 u_i Air velocity (m/s)
 u_p Particle velocity (m/s)
 τ_{ij} Stress tensor ($\text{kg/m}\cdot\text{s}^2$)
 R_{ij} Reynolds stress tensor ($\text{kg/m}\cdot\text{s}^2$)
 λ Thermal conductivity of air ($\text{W/m}\cdot\text{K}$)
 Y_i Mass fraction of species i
 J_i Diffusion flux of species i ($\text{kg/m}^2\cdot\text{s}$)
 S_m Source term for mass ($\text{kg/m}^3\cdot\text{s}$)
 S_{mo} Source term for momentum ($\text{kg/m}^2\cdot\text{s}^2$)
 S_e Source term for energy (W/m^3)
 S_{Y_i} Source term for species i ($\text{kg/m}^3\cdot\text{s}$)
 Q_{rad} Radiation heat transfer (W)
 d_p Particle diameter (m)

† School of Mechanical Engineering, Pusan National University (PNU), Associate Professor
E-mail: esyeom@pusan.ac.kr

* School of Mechanical Engineering, PNU,
MS student.

Re	Reynolds number
Sh_{AB}	Sherwood number
Nu	Nusselt number
N	Molar flux of vapor ($\text{kgmol/m}^2\text{s}$)
k_c	Mass transfer coefficient (m/s)
$D_{i,m}$	Diffusion coefficient of vapor in the bulk (m^2/s)
h	Convective heat transfer coefficient ($\text{W/m}^2\text{K}$)

1. 서론

UN 산하기관인 국제해사기구(IMO, International maritime organization)의 규제 강화로 인해 조선 산업은 기존 탄화수소 연료에서 친환경 대체연료를 개발하는 것이 중요하다. 국제해사기구는 2050년까지 2008년 대비 국제해운부문 온실가스 배출량을 최소 50% 감축하기로 합의하였다.⁽¹⁾ 따라서 대체 가능한 무탄소 연료의 도입이 필요하다. 이러한 친환경 연료 중 암모니아는 분자 내 탄소를 포함하지 않기 때문에 연소 시 soot이나 이산화탄소 및 일산화탄소를 배출하지 않는 점에서 매력적인 연료이다.

하지만 암모니아는 낮은 증류화염속도와 낮은 화염온도, 제한된 가연범위 그리고 자가 발화에 대한 높은 저항성 등 여러가지 단점을 갖고 있다.⁽²⁾ 또한 다중 홀 인젝터의 경우 암모니아는 감압 비등(Flash-boiling) 조건에서 분무붕괴(Spray collapse)로 인해 분무도달거리가 증가한다.⁽³⁾ 여기서 감압 비등이란 특정 온도의 액체를 포화 압력보다 낮은 챔버로 분사 시 과열된 액체 내부에서 기포가 지속적으로 생성되는 이상 유동의 특징을 갖는 현상이다.⁽⁴⁾ 이러한 감압비등으로 증가한 분무도달거리는 연료가 연소실 벽면에 연료가 점착되는 벽 젖음(wall wetting)의 가능성을 높여 점착된 벽면에 불완전 연소와 같은 원치 않는 연소 현상이 발생할 수 있다.⁽⁵⁾

이러한 순수 암모니아 연료의 분무 특성을 이해하기 위해 관련 연구가 최근 보고되고 있다. Fan 등은 압축식 스웰 인젝터 기반의 암모니아와 에탄올 분무 특성을 비교 분석하여 암모니아가 미립화 성능이 높다는 것을 관찰하였

다.⁽⁶⁾ PELÉ 등은 직접 분사식 가솔린 엔진에서 가솔린, 에탄올과 달리 암모니아가 감압비등으로 인한 분무 붕괴로 길어진 분무도달거리를 관찰하였으며, 암모니아가 엔진 내 공기 밀도와 온도에 민감하다는 것을 보고하였다.⁽³⁾ 현재까지 순수 암모니아의 분무 특성에 대한 연구는 많지 않으며, 해당 연구의 대부분은 실험으로 수행되었다. 또한 암모니아를 사용한 분무 실험은 제약사항이 존재한다. 암모니아는 유독성으로 인해 저장 탱크가 환기가 잘 되는 공간에 위치해야 한다. 그리고 황동이나 구리와 같은 금속은 암모니아와 접촉 시 부식되어 신중한 설계가 필요하며, 부식되지 않는 재료로 대체되어야 한다는 점에서 순수 암모니아를 사용한 실험은 어려운 점이 존재한다.⁽⁷⁾ 따라서 시물레이션을 통해 암모니아의 분무 거동을 해석하는 것은 실험의 제약성을 보완하여 시간 및 비용적 측면에서 유용하다고 할 수 있다.

본 연구에서는 압축식 스웰 인젝터에서 분사된 암모니아의 분무 특성을 분석하고자 한다. 이를 위해 에탄올, 노말데케인(n-Decane)에 대한 분무 특성을 시물레이션을 수행하여 결과를 비교하였다. 액체에 따라 달라지는 속도 분포와 분무 중심의 속도, 분무 액적의 크기를 분석하였다.

2. 연구 방법

2.1 챔버 형상 및 경계조건

Fig. 1은 전산해석을 위해 모델링한 2차원 챔버 메시(mesh)를 나타낸다. Lucchini 등과 Senecal 등은 격자의 해상도가 분무 시물레이션 결과에 미치는 영향을 분석하였으며, RANS (Reynold Averaged Navier-Stokes) 프레임워크에서 전형적인 격자 크기는 약 0.25-0.5mm인 것으로 관찰하였다.⁽⁸⁻⁹⁾ 본 연구에서는 격자 요소(element)의 크기를 0.25mm로 선정하여 메시지를 구성하였다. 메시의 절점(node)과 요소(element)의 개수는 각각 71,245 및 70,124이다. 연료의 분사 및 증발이 일어나는 챔버는 계산시간을

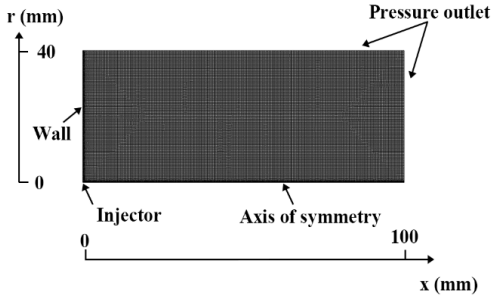


Fig. 1. Computational mesh for simulation

줄이기 위해 축 대칭 조건으로 설정되었다. 압축식 스월노즐 인젝터(Pressure-swirl atomizers)가 위치한 벽면은 점착 조건(no-slip)과 단열 조건을 가지고 출구는 대기압 조건을 가진다.

2.2 지배 방정식

CFD 해석을 위해 Fluent 2022 R1(ANSYS, Inc., USA)를 사용하여 유동해석 및 상변화해석을 수행하였다.

2.2.1 연속상 (Continuous phase)

연속상(공기)은 Eulerian 좌표계에서 계산되었으며, 시간평균기법을 통한 RANS 방정식이 사용되었다. 이때 식 (2)의 운동량 방정식에서 레이놀즈 응력 항인 R_{ij} 는 시간 평균화 절차에 의해 추가된 미지수이며, Boussinesq의 가설을 통해 와점성계수(Eddy viscosity)를 계산하여 R_{ij} 를 모델링 할 수 있다. 질량, 운동량, 에너지 보존 방정식 이외에도 공기-연료 혼합물에서 연속 및 분산상의 화학종(species) 간의 상호작용을 고려하기 위해 화학종 전달 방정식을 고려하였다.

연속 방정식

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = S_m \quad (1)$$

운동량 방정식

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial R_{ij}}{\partial x_j} + S_{m_o} \quad (2)$$

에너지 방정식

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i H)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + S_e \quad (3)$$

화학종 전달 방정식

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_i) = -\frac{\partial}{\partial x_j} (J_i) + S_{Y_i} \quad (4)$$

2.2.2 분산상 (Dispersed phase)

분산상(연료 입자)은 Lagrangian 좌표계에서 DPM(Discrete phase model)을 사용하여 계산되었다. DPM은 분산상의 액적의 궤적(trajjectory)을 힘 평형 방정식을 통해 추적한다(식 5). 식 5에서 $\sum F_i$ 항은 분산상과 연속상 간의 외력의 합을 의미한다. 액적의 온도는 액적과 공기 간의 현열(Sensible heat)로 인한 열 교환과 대류 및 잠열로 인한 열전달을 포함하는 에너지 방정식에서 갱신된다(식 6). 에너지 방정식에서 대류 열전달 계수(h)는 너셀 수 상관식에서 계산된다(식 7). 증발하는 액적은 증발과 비등 두 가지 방법을 통해 구현되었다. 증발시 몰 유속(molar flux)은 액적 표면과 공기의 증기 농도차에 의해 계산되며(식 8), 이때 물질 전달 계수(k_c)는 쉐우드 수 상관식에서 구할 수 있다(식 9). 그리고 액적 온도가 비등점에 도달하면 비등 방정식이 적용된다(식 10).

힘 평형 방정식

$$m_p \frac{du_p}{dt} = \sum F_i + \rho_p g \quad (5)$$

(액적) 에너지 방정식

$$m_p c_p \frac{dT}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \frac{dm_p}{dt} h_{fg} + Q_{rad} \quad (6)$$

Nu 수 상관식

$$Nu = \frac{h d_p}{\lambda} = 2.0 + 0.6 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (7)$$

확산 구배식

$$N = k_c(C_s - C_\infty) \quad (8)$$

Sh_{AB} 상관관계식

$$Sh_{AB} = \frac{k_c d}{D_{i,m}} = 2.0 + 0.6Re^{1/2} Sc^{1/3} \quad (9)$$

비등 방정식

$$\frac{d(d_p)}{dt} = \frac{4\lambda}{\rho_p c_{p,\infty} d_p} (1 + 0.23\sqrt{Re}) \times \ln\left[1 + \frac{c_{p,\infty}(T_\infty - T_p)}{h_{fg}}\right] \quad (10)$$

2.3 시뮬레이션 조건

과도 상태(Transient) 조건에서 인젝터에서 분사후 2ms동안 해석이 진행되었다. 이때 시간 간격은 10^{-4} - 10^{-5} s 범위에서 잔차(Residual)를 비교하여 특히 연속방정식 잔차의 최고값이 0.1 보다 작아지는 값인 5×10^{-5} s로 설정되었다. DPM에서 암모니아에 대응하는 상변화 메커니즘이 없기 때문에 별도의 암모니아-공기 반응 메커니즘을 활용하여 암모니아 액적의 상변화를 구현하였다.⁽¹⁰⁾ 0.1mm 직경을 가지는 인젝터에서 분사압은 50MPa이며, 분무각(spray half angle)은 30°이다. 분사되는 액체의 온도는 50°C, 비가압 조건에서 챔버의 분위기 온도는 500°C로 설정되었다(Table 1).

Table 1. Simulation conditions

Injection pressure (MPa)	50
Spray half angle (°)	30
Orifice diameter (mm)	0.1
Injection temperature (°C)	50
Ambient temperature (°C)	500
Injection duration (ms)	2

2.4 액체 물성치

분무 특성을 분석하기 사용된 암모니아, 에탄올과 노말데케인의 물성치를 Table 2에 정리하였다. 암모니아는 두 액체에 비해 낮은 비등

Table 2. Properties of each injection fluid

	Ammonia	Ethanol	n-Decane
Density (kg/m ³)	602.8	790	730
Boiling point (°C)	-33.4	78.4	173.9
Latent heat (kJ/kg)	1369	921	277
Viscosity (μ Pas)	131.7	1082	2400
Surface tension (mN/m)	20.5	21.9	26.3

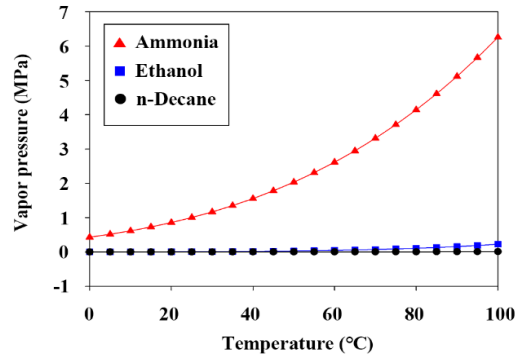


Fig. 2. Vapor pressure curves of each injection fluid

점과 높은 잠열(latent heat)을 가지고 있다. 즉 암모니아는 액적 증발이 잘 일어나는 동시에 잠열로 인한 액적의 온도 감소가 크다는 것을 알 수 있다. 또한 대기압 조건에서 각 연료의 온도에 따른 증기압(Vapor pressure) 곡선을 Fig. 2에 도시하였다. 암모니아는 노말데케인과 에탄올보다 훨씬 높은 증기압을 가진 것을 알 수 있다. 따라서 동일한 온도 및 압력 조건이라 할 지라도 암모니아는 비교 액체에 비해 높은 휘발성(Volatility)을 가져 분무 시 액적 기화를 촉진한다.⁽¹¹⁾ 또한 펜테인(Pentane)과 같이 높은 증기압의 특성을 갖는 연료가 감압 비등의 강도를 증가시키는 것으로 알려져 있다.⁽¹²⁾ 증기압 데이터는 NIST-REFPROP 데이터베이스 프로그램에서 얻은 값이다.

3. 결과

3.1 속도 분포

Fig. 3에 분무 시작 후 $t=2$ ms일때 세 가지 액체의 x 방향 속도(U) 분포를 비교하였다. 에탄올은 r방향으로 넓게 퍼지는 것을 관찰할 수 있

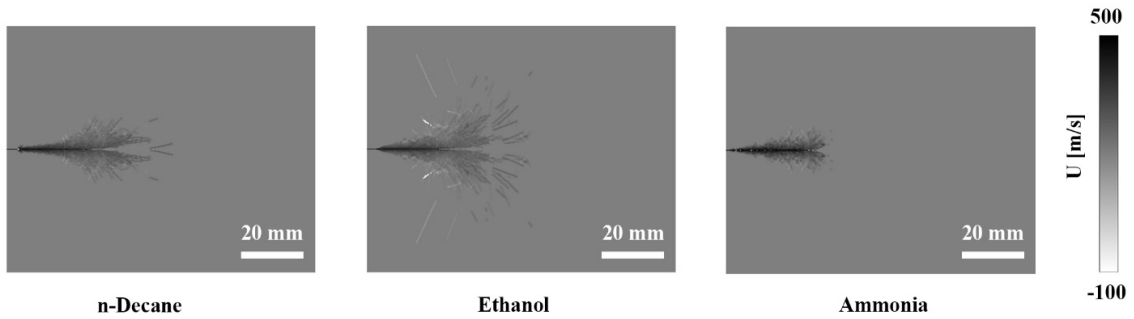


Fig. 3. Distribution of x-directional velocity (U) for each spray at $t = 2\text{ms}$

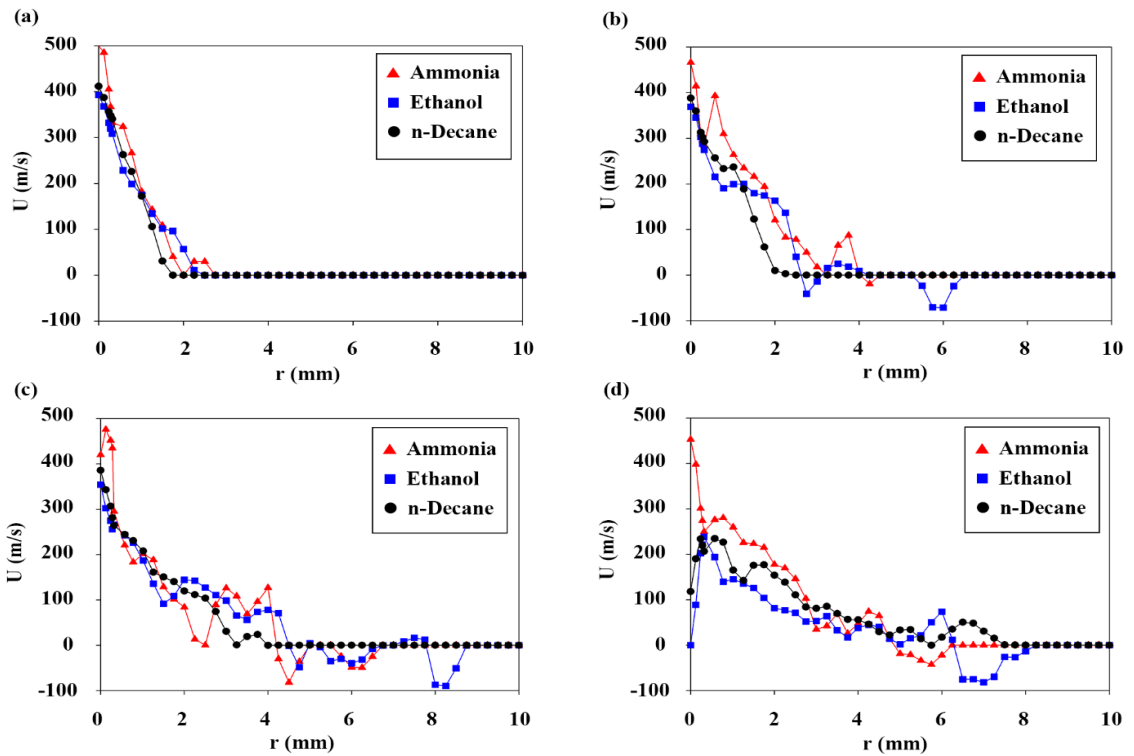


Fig. 4. Velocity profile along r -direction at $t=2\text{ms}$ (a) $x=10\text{mm}$ (b) $x=15\text{mm}$ (c) $x=20\text{mm}$ (d) $x=25\text{mm}$

었다. 반면에 암모니아는 분무 형상이 좁게 퍼져 있으며, 중심 부근에서 속도 분포 값이 높은 것을 관찰할 수 있었다.

이는 암모니아의 분무 특성이 다른 액체에 비해 분위기 온도에 더 민감하며 이로 인해 발생한 감압비등 조건에서 분무 붕괴 메커니즘으로 이해할 수 있다.⁽³⁾ 감압비등 조건에서 분무 중심의 기포가 성장하고 잠열에 의한 표면 증발

로 분무 중심 부근의 액적의 온도가 급격하게 감소한다. 따라서 중심 부근의 증기가 응축하고, 분무 중심에 낮은 압력 영역(low-pressure zone)을 생성하여 분무의 형상은 중심에 모이게 된다.⁽¹³⁾

3.2 분무 중심 속도 분포

Fig. 4에는 각 액체의 분무 중심 근처에서의 속도 분포를 도시하였다($t=2\text{ms}$). 속도 값은 서

로 다른 상수 x 값을 갖는 수직선에서 추출한 값이며 따라서 r 위치에 따른 속도(U) 값의 분포이다. r 값이 0mm로 갈수록 분무의 중심, 10mm로 갈수록 분무의 가장자리를 의미한다. $x=10$ mm인 지점은 인젝터가 위치한 벽면과 가장 가까우며, 각 액체의 속도 분포의 요동(fluctuation)이 크지 않은 것을 확인할 수 있다(Fig. 4a). x 가 15mm이상 떨어진 부분부터 분무가 주변의 공기와 상호작용하여 발생한 와류로 인해 속도 분포가 요동치며, 음의 속도 값이 나타나는 것을 확인할 수 있다. 모든 위치에서 암모니아는 노말데케인과 에탄올보다 $r=0$ 으로 갈수록 속도 값이 큰 것을 알 수 있다. 이는 감압 비등으로 인해 분무가 분산되지 않고 중심에 모이는 분무 붕괴로 인한 속도 상승의 결과라 볼 수 있다.⁽¹⁴⁻¹⁵⁾

3.3 액적 크기 비교

세 액체의 분무 액적 미립화 성능을 비교하기 위해 SMD(Sauter mean diameters)가 사용되었다. SMD는 액적의 평균 직경을 나타내며 다음과 같이 계산된다.

$$SMD = \frac{\sum d_p^3}{\sum d_p^2} \quad (11)$$

Fig. 5는 $t=2$ ms에서 각 액체의 SMD분포를 상자 그림(Box plot)을 통해 나타낸 것이다. 암모니아에 비해 노말데케인과 에탄올은 높은 SMD 값과 산포가 크게 나타남을 확인할 수 있다. 두 액체는 높은 점성과 낮은 증기압의 물성치를 가지기 때문에 저조한 미립화 특성을 나타낸다.⁽¹⁶⁾ 반면에 암모니아는 가장 낮은 SMD 값과 조밀한 분포를 보인다. 이는 암모니아가 낮은 비등점과 낮은 점성을 가져 두 액체보다 비교적 쉽게 증발되고 액적이 분열(breakup)되며, 감압비등에 의해 향상된 액적 분열과 빠른 증발 속도에 의한 결과라 볼 수 있다.⁽¹⁴⁾ 결과적으로 암모니아는 동일한 환경 조건에서 다른 액체에 비해 미립화 성능이 높으며, 이는 감압 비등이 SMD 값

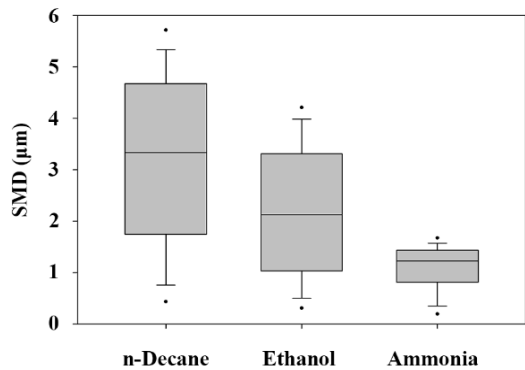


Fig. 5. SMD distribution of each fluid at $t=2$ ms

을 줄이고 액적 크기의 균일성을 향상시킨다는 기존의 실험 결과와 부합한다.^(6, 17-18)

4. 결론

본 연구는 암모니아와 에탄올, 노말데케인에 대한 분무 특성을 시뮬레이션을 수행하여 결과를 비교 분석하였다. 암모니아는 다른 액체와 비교하여 상이한 분무 특성을 보였다. 거시적인 분무 형상에서 암모니아는 좁은 분무 형태를 가지며(narrow-dispersed), 분무 중심에서 속도 분포가 비교적 큰 값을 보였다. 또한 SMD 분포를 통해 암모니아 액적의 크기는 작고 조밀한 분포를 나타냈다. 해당 결과들은 감압 비등으로 인한 분무 특성이며 따라서 본 연구에서 수행한 암모니아의 시뮬레이션은 감압 비등 분무 특성을 충분히 반영할 수 있다는 것을 시사한다.

후 기

이 논문은 2021년도 정부(산업통상자원부)의 재원으로 한국산업기술평가관리원의 지원을 받아 수행된 연구임 (No.20017612, 무탄소 연료 주추진 엔진의 핵심부품 기술 개발).

REFERENCE

- 1) Park, G., & Cho, K., 2017, "A study on the change of EEOI before and after modifying

- bulbous at the large container ship adopting low speed operation,” *J. Mar. Eng. Technol.*, Vol. 41(1), pp. 15-20.
- 2) Garabedian, C. G., & Johnson, J. H., 1966, “The theory of operation of an ammonia burning internal combustion engine,” ARMY TANK-AUTOMOTIVE CENTER WARREN MI.
 - 3) Pelé, R., Mounaïm-Rousselle, C., Bréquigny, P., Hespel, C., & Bellettre, J., 2021, “First study on ammonia spray characteristics with a current GDI engine injector.” *Fuels*, Vol. 2(3), pp. 253-271.
 - 4) Chang, M., Lee, Z., Park, S., & Park, S., 2020, “Characteristics of flash boiling and its effects on spray behavior in gasoline direct injection injectors: A review,” *Fuel*, Vol. 271, pp. 117600.
 - 5) Krämer, M., Kull, E., & Wensing, M., 2016, “Flashboiling-induced targeting changes in gasoline direct injection sprays,” *Int. J. Engine Res.*, Vol. 17(1), pp. 97-107.
 - 6) Fan, Y., Ohtomo, M., Kasuga, S., Iki, N., Kurata, O., Tsujimura, T., & Furutani, H., 2021, “Characteristics of Ammonia Spray Injected by Pressure-Swirl Atomizers,” In *International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ICLASS)*, Vol. 1, No. 1.
 - 7) Parod, R. J., 2014, *Ammonia*, Academic Press, Cambridge, Massachusetts, pp. 206-108.
 - 8) Lucchini, T., D’Errico, G., & Ettore, D., 2011, “Numerical investigation of the spray–mesh–turbulence interactions for high-pressure, evaporating sprays at engine conditions,” *Int. J. Heat Fluid Flow*, Vol. 32(1), pp. 285-297.
 - 9) Senecal, P. K., Pomraning, E., Richards, K. J., & Som, S., 2012, “Grid-convergent spray models for internal combustion engine CFD simulations,” *Proc. ASME Fall Conference*, Vol. 55096, pp. 697-710.
 - 10) Nakamura, H., Hasegawa, S., & Tezuka, T., 2017, “Kinetic modeling of ammonia/air weak flames in a micro flow reactor with a controlled temperature profile. *Combustion and Flame*,” Vol. 185, pp. 16-27.
 - 11) Kim, D., Martz, J., & Violi, A., 2016, “Effects of fuel physical properties on direct injection spray and ignition behavior,” *Fuel*, Vol. 180, pp. 481-496.
 - 12) Zhao, W., Yan, J., Gao, S., Lee, T. H., & Li, X., 2022, “Effects of fuel properties and aerodynamic breakup on spray under flash boiling conditions,” *Appl. Therm. Eng.*, Vol. 200, pp. 117646.
 - 13) Guo, H., Ding, H., Li, Y., Ma, X., Wang, Z., Xu, H., & Wang, J., 2017, “Comparison of spray collapses at elevated ambient pressure and flash boiling conditions using multi-hole gasoline direct injector,” *Fuel*, Vol. 199, pp. 125-134.
 - 14) Yan, J., Gao, S., Liu, W., Chen, T., Lee, T. H., & Lee, C. F., 2021, “Experimental study of flash boiling spray with isooctane, hexane, ethanol and their binary mixtures,” *Fuel*, Vol. 292, pp. 120415.
 - 15) Li, X., Li, T., & Xu, M., 2019, “Effect of ambient temperature on flash-boiling spray characteristics for a multi-hole gasoline injector” *Exp. Fluids*, Vol. 60(7), pp. 1-12.
 - 16) Mohan, B., Yang, W., Yu, W., & Tay, K. L., 2017, “Numerical analysis of spray characteristics of dimethyl ether and diethyl ether fuel,” *Applied Energy*, Vol. 185, pp. 1403-1410.
 - 17) Zeng, W., Xu, M., Zhang, Y., & Wang, Z., 2013, “Laser sheet dropsizing of evaporating sprays using simultaneous LIEF/MIE techniques,” *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 34(1), pp. 1677-1685.
 - 18) Yang, S., Wang, T., Jia, M., Shen, S., & Yao, Z., 2016, “An experimental study on microscopic characteristics of flash boiling spray with extended glare point velocimetry and sizing,” *At. Sprays*, Vol. 26(5).