

양방향 펄스전압에 의한 배기가스처리의 수치해석

최종모, 전재룡, 고광철*, 강형부*
 한양대 대학원 전기공학과, *한양대 전자전기공학부

The Numerical Simulation of the Flue-Gas Reactor
 Using Bidirectional Pulse Voltage

Jung-Mo Choi, Jae-Ryong Jeon, Kwang-Cheol Ko, Hyung-Boo Kang
 Hanyang University

Abstract - Recently plasmas have been used to reduce the undesirable gases SO₂, NO, and NO₂. Especially bidirectional pulsed voltages were used to increase the efficiency of flue-gas reactors. The particle-Mesh model using NGP (Nearest-grid-point) and FEM (Finite Element Method) calculate the detailed space-time variations of the electric fields for the streamer and it makes the characteristics of reactor more clearly. In this simulation NO is considered a dominant gas.

1. 서 론

최근 환경분야에서 플라즈마의 응용이 많은 관심을 끌고 있는 가운데, 일본 MITI위원회는 배기가스로부터 NO_x와 SO_x를 제거시키는 여러 방법들 중에서 펄스 플라즈마 처리를 가장 간단하며, 경제적이라고 결론지었다 [1]. 이러한 세계적 추세에서 지금까지의 연구로 알 수 있는 사실은 DC전압을 사용한 경우에 비하여 펄스전압을 이용한 배기가스처리기술이 NO_x, SO_x와 같은 유해 물질을 현저하게 감소시킨다는 것이다. 그러나, 기존의 단방향 펄스를 이용하는 것에 비하여 양방향 펄스를 사용하는 것은 보다 높은 효율의 배기가스처리기를 제작하는 것을 가능하게 할 것으로 보인다.

배기가스처리기의 완벽한 이론적 해석은 아직까지도 불가능한 것으로 알려져 있다. 많은 이유들 가운데 한가지는 정·부극성 스트리머 증배에 따르는 시·공간적 전개해석이 정확하게 알려져 있지 않기 때문인데, 코로나와 같은 스트리머가 다양한 채널을 형성하고 있으며, 충돌에 의한 준안정상태 또는 여기상태의 입자, 이온, 전자들이 그 원인이 된다. 이러한 이론적 해석의 부재로 인하여 배기가스처리기의 최적 설계나, 그 특성을 파악하는데 많은 어려움을 겪고 있는 것이 현실이다.

이 논문에서는 양방향 펄스전원을 이용한 배기가스처리기 특성을 파악하기 위해 유한요소법(Finite Element Method:FEM)과 NGP(Nearest-Grid-Point)법을 이용한 입자 모델링을 사용하였으며, 몬테칼로법을 사용하여 NO가스에서의 충돌전리 현상을 모의실험하였다. 배기가스처리장치에 양방향 펄스전압이 인가되었을 때 전자의 이동을 미시적으로 모의하여 처리반응 후의 전압과 전계를 시·공간적으로 해석할 수 있는 방법을 모색했다.

2. 본 론

이 논문에서 다루는 모의실험의 대상인 배기가스처리기의 단면은 그림 1과 같다. 크게 중심의 텅스텐와이어와 외곽의 스테인레스스틸 원통전극, 좌·우면의 프랜지가

원통 양쪽 끝부분에 위치한 배기가스 출입구로 구성되어 있다. 왼쪽면 전원측의 프랜지에는 절연을 위하여 테일린을 이용하였고, 오른쪽면의 프랜지는 아크릴소재를 사용하여 관측과 절연을 꾀하였다.

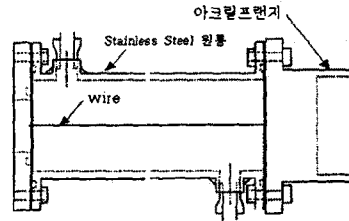


그림1. 배기가스처리기의 단면도

공간을 해석하는 방법에 있어서는 유한요소법을 사용하여, 보다 융통성 높은 해석을 가능하게 했고, 입자법을 사용하여 유체법에서는 고려할 수 없는 충돌을 모의실험할 수 있게 하였으며, 충돌을 고려하기 위하여 몬테칼로(Monte Carlo)법을 사용하였다. 이 몬테칼로법은 기본적으로 난수(亂數)를 사용하며, 부가적으로 기체의 충돌 단면적, 수밀도, 입자의 드리프트속도와 같은 데이터와 적절한 Δt 를 설정하여 주는 것이 필요하다.

2.1 요소분할(Preprocess)

이 논문에서 해석한 반응기는 그 중심을 와이어 전극으로 하고, z방향 전계가 일정하다고 가정한 축대칭 2차원으로 하며, 요소분할 된 모양은 그림 2에 나타내었다. 특히, 유한요소법은 유한차분법에 비해 곡면경계에서의 요소분할이 보다 유연하고, 필요한 위치의 전계, 전압을 자유롭게 구해낼 수 있다.

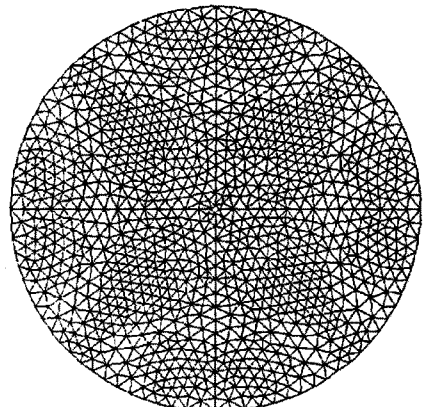


그림2. 반응기 내부의 요소분할

2.2 입자법과 몬테칼로법

이 논문에서 반응기의 해석을 위해 사용된 입자법은 다음과 같이 비교적 단순한 알고리즘을 가진다.

1. 초기전자의 속도를 계산하기 위해 라플라스방정식을 이용한 초기 전계를 계산한다.
 2. 플라즈마를 구성하는 하전입자에 대한 운동방정식 $f = ma = q(E + v \times B)$ 를 이용하여, 이동한 입자의 위치를 계산한다.
 3. 이동된 입자를 고려하여 포아송방정식을 풀고, 각 node와 element에서의 전압, 전계값을 계산한다.
 4. 계산된 전계값을 이용하여 위의 과정을 반복한다.
- 이 논문에서는 그림 1에서 보이는 것처럼 중심와이어에 그 크기가 200kV이고, 양방향 펄스폭이 각각 50nS 인 전원을 연결한 것을 모의실험 하므로, 고전압 저전류로 간주하여, 운동방정식 $f = ma = q(E + v \times B)$ 는 자계를 무시한 $f = ma = qE$ 로 생각할 수 있다. 초기전자는 1개로 가정하고, 초기 라플라스전계에 의해서 드리프트속도가 결정된다.

입자법에서 충돌을 고려하기 위해서는 몬테칼로법(Monte-Carlo Collision Method)을 도입해야한다. 몬테칼로법은 난수의 개념을 도입하여 입자충돌을 모의할 수 있도록 해주며, 충돌의 빈도가 높은 플라즈마의 해석에 적합한 방법이다.

2.2.1 전계의 계산

전계의 계산은 앞서 말한 것처럼 FEM을 사용하여 계산한다. 그림 2에서 임의의 요소(element) e의 전위 V_e 를 근사적으로 구하고, 연속적으로 연결되는 여러 요소들간의 상관관계를 알아내면, 그 식은 다음과 같다.

$$V(x, y) \approx \sum_{e=1}^N V_e(x, y) \quad (1)$$

단, N은 요소의 개수이다. 요소의 전위 V_e 를 구하는 가장 일반적인 삼각요소 다항근사식은

$$V_e(x, y) = a + bx + cy \quad (2)$$

가 되는데, 이와 같이 선형적 변화를 가정하므로써 요소 내부에서의 전계는 일정하게 된다. 초기전자의 드리프트속도를 결정하는 전계는 라플라스방정식 $\nabla^2 V = 0$ 를 이용하고, 충돌에 의한 전리작용으로 공간전하가 발생한 이후의 전계계산은 포아송방정식 $\nabla^2 V = -\rho/\epsilon$ 을 이용하여 계산한다.

2.2.2 운동방정식의 계산

운동방정식 $f = ma = qE$ 을 이용하여, 드리프트에 의한 입자의 이동위치를 계산한다. 드리프트 이전의 속도를 v_{old} , 이동된 위치에서의 속도를 v_{new} 라 하면, 운동방정식은

$$qE_x = m \frac{v_{x, new} - v_{x, old}}{\Delta t} \quad (3)$$

$$qE_y = m \frac{v_{y, new} - v_{y, old}}{\Delta t} \quad (4)$$

로 표현되고, $v_x = dx/dt$, $v_y = dy/dt$ 를 이용하면,

$$x_{new} = \frac{q}{m} E_x (\Delta t)^2 + v_{x, old} \Delta t + x_{old} \quad (5)$$

$$y_{new} = \frac{q}{m} E_y (\Delta t)^2 + v_{y, old} \Delta t + y_{old} \quad (6)$$

가 되어, Δt 가 지난 후의 입자위치를 파악할 수 있다.

2.2.3 충돌의 계산

충돌을 고려한 모의실험을 위해서 필요한 몬테칼로법은 다음과 같은 단계로 이루어진다.

1. 충돌의 판정
2. 충돌 종류의 판정
3. 충돌 후 각 입자의 에너지 계산

4. 산란각 계산

먼저, 전자가 Δt 동안 충돌할 확률은 다음과 같다(2).

$$P_{collision} = 1 - \exp[-n_{gas} \sigma v \Delta t] \quad (7)$$

단, n_{gas} 는 중성입자의 수밀도, σ 는 충돌단면적, v 는 전자의 속도이다. 임의의 균일 난수 R_1 을 발생시켜 확률 $P_{collision}$ 보다 작게 되면, 충돌이 발생한 것으로 판정한다. 또, 해석영역 대부분의 높은 라플라스전계가 고에너지의 전자를 생성하므로, 비탄성 충돌인 전리충돌만을 가정한다. 전자와 중성입자가 전리충돌 하면, 충돌 후 입자의 에너지 $E_{scattered, e}$, 새로 생성된 입자의 에너지 $E_{created, e}$ 는 다음과 같은 식으로 나타내어진다(2).

$$E_{scattered, e} + E_{created, e} = E_{incident, e} - E_{ionization} \quad (8)$$

$$E_{scattered, e} = 7.1 \tan[R_2 \tan^{-1}(\frac{E_{incident, e} - E_{ionization}}{2 \times 7.1})] \quad (9)$$

단, R_2 는 균일 난수를 의미한다. 위의 식을 이용하여 각각의 에너지를 계산하고, 충돌입자와 중성입자 사이의 산란각 θ 와, 새로 발생한 입자의 방향 ϕ 는 다음과 같다(2).

$$\cos \theta = \frac{2 + E_{scattered} - 2(1 + E_{scattered})^{R_3}}{E_{scattered}} \quad (10)$$

$$\phi = \frac{1}{2} \pi R_4 \quad (11)$$

단, R_3, R_4 는 균일 난수이다. 또, 이 논문은 직교좌표를 사용하므로 충돌입자와 생성된 입자의 위치를 변환해주는 subroutine도 필요하게 된다.

e⁻ on NO

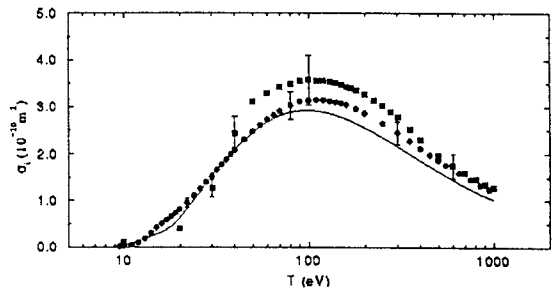
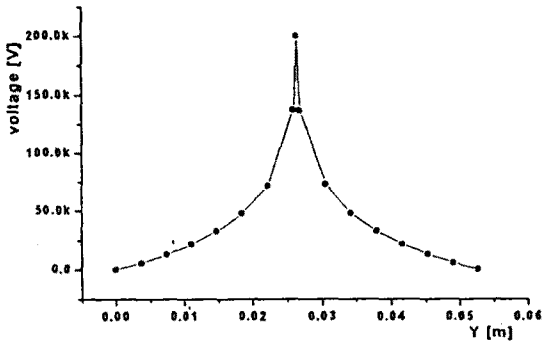


그림3. NO가스의 전리충돌 단면적

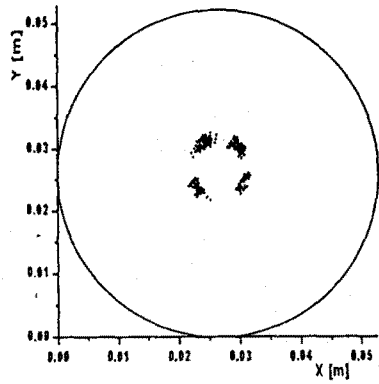
●은 Rapp에 의한 실험값이고, ■은 Iga et al에 의한 실험값, —은 W. Hwang[3]에 의한 것이고, 본 논문에서는 —의 값을 이용하였다.

2.3 모의실험 결과

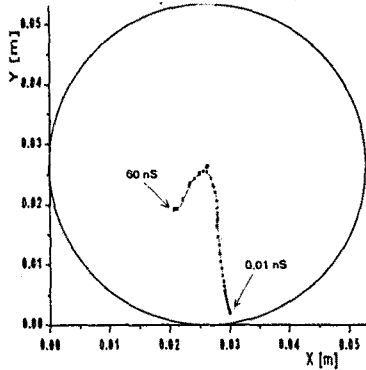
그림 4는 원통의 중심이 좌표 (26.35, 26.35)이고, 지름이 52.7mm인 모델에서의 결과이다. 그림(a)는 x가 26.35mm로 고정되어 있을 때, y에 따른 전압의 분포를 나타낸 것이다. 그림(b)는 single particle의 이동 경로를 $\Delta t = 0.01$ nS 간격으로 나타낸 것인데, 식(9)와 같은 에너지의 변화로 충돌후의 속도가 달라지고 있음을 볼 수 있다. 그림(c)는 50nS에서 입자의 분포를 나타낸다. 0부터 50nS까지 +200kV의 펄스가 인가되기 때문에 부극의 성질을 가지는 입자들이 중심와이어 주변에 모이고, 50nS 이후 와이어 주변의 높은 전계에 의해 전리충돌이 활발하게 발생하는 것을 볼 수 있다. 또, 50nS에서 100nS까지는 -200kV가 인가되기 때문에 그림(d)와 그림(e)처럼 외부원통전극 쪽으로 입자들이 빠르게 이동하는 것을 볼 수 있다. 이와 같이 고압의 양방향전압을 사용함으로써 상대적으로 더 많은 입자를 전리시킬 수 있다는 것을 알 수 있고, 보다 효과적인 배기 가스처리를 예상할 수 있다.



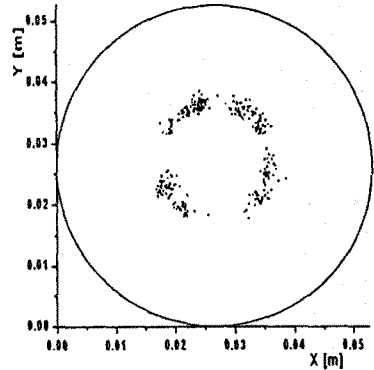
(a) 40ns에서의 전압분포



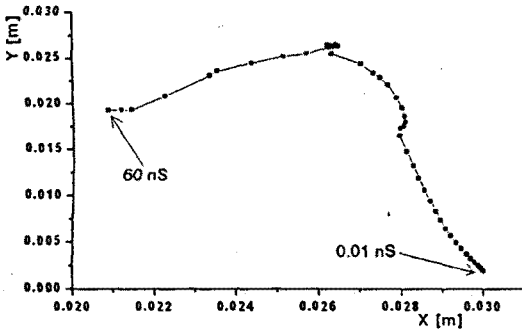
(d) 55ns에서의 입자분포



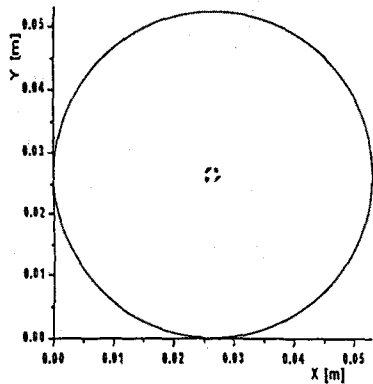
(b-1) single particle의 이동



(e) 60ns에서의 입자분포



(b-2) single particle의 이동



(c) 50ns에서의 입자분포

그림 4. 모의실험의 결과

3. 결 론

FEM을 이용하여 공간을 해석하고, 몬테칼로법과 입자법을 사용하여, 플라즈마 내에서의 입자의 충돌과 시·공간적 전압, 전계를 계산하였고, 양방향 펄스전압을 사용함으로써 보다 효율적으로 전자를 분포시킬 수 있다는 사실을 모의실험하였다.

앞으로 입자의 전하량과 질량의 변화를 준 모의실험을 반복할 필요를 느끼며, 계산시간의 단축을 위하여 알고리즘의 보완이 필요할 것으로 보인다.

(참 고 문 헌)

- [1] John J. Lowke, Richard Morrow, "Theoretical Analysis of Removal of Oxides of Sulphur and Nitrogen in Pulsed Operation of Electrostatic Precipitators", *IEEE Trans. Plasma Sci.*, vol. 23, 661, 1995
- [2] C.K. Birdsall, "Particle-in-Cell Charged-Particle Simulations. Plus Monte Carlo Collisions With Neutral Atoms, PIC-MCC", *IEEE Trans. Plasma Sci.*, vol. 19, 65, 1991
- [3] W.Hwang, Y-K Kim, M.E. Rudd, "New model for electron-impact ionization cross sections of molecules", *J. Chem. Phys.*, 104, 2956, 1996
- [4] 송태현, 박정호, 고광철, 강형부, "입자법을 이용한 와이어·이온·플라즈마원의 수치적 해석", *KIEE '97 Annual Summer Conference*, E. 1782, 1997