

## DR15)            대수정규분포를 이용한 다분산 에어로졸의 침착에 관한 연구

### Log-normal Size Distribution Theory for Deposition of Polydisperse Aerosol Particles

박성훈 · 이규원  
 광주과학기술원 환경공학과

#### 1. 서    론

단한 반응기 내부에 부유하는 에어로졸 입자들의 크기분포는 응집, 응축, 확산에 의한 침착, 중력침강 및 누출과 같은 여러 기작들에 의해 변화한다. 특히 확산 및 중력침강에 의해 일어나는 입자의 침착 (deposition)은 에어로졸 측정기기의 오차분석, 호흡기내부의 미세입자 침착, 건물내부의 입자상 물질의 농도 및 크기분포 변화 등 여러 응용분야에 관련되는 중요한 기작이다.

다분산 에어로졸의 크기분포의 변화를 나타내는 동력학방정식을 풀기 위해, 많은 연구자들이 에어로졸의 크기분포를 대수정규분포라 가정 한 후 크기분포의 파라미터(parameter)들을 세 개의 주요 모멘트들의 함수로서 계산하는 방법을 사용해왔다 (Clark, 1976; Lee et al., 1984; Whitby, 1985; Pratsinis, 1988). 모멘트 기법으로 잘 알려진 이 방법은 간단하면서도 입자들의 크기분포 변화에 대한 중요한 정보를 제공할 수 있다는 장점을 지니고 있다(Pratsinis et al., 1986). 그러나, 침착기작에 대해서는 침착계수가 매우 비선형적인 이유로 인해 모멘트 기법을 사용한 적절한 연구가 없었다. 이 때문에 침착항까지 고려한 에어로졸 동력학 시뮬레이션에 어려움이 있어왔다.

따라서 본 연구에서는 침착계수에 적절한 근사를 도입하여 침착 방정식을 모멘트 기법으로 푸는 새로운 방법을 제시하였다.

#### 2. 침착계수

브라운확산과 난류확산 및 중력침강이 동시에 일어날 때 입자크기분포의 변화는 다음 식에 의해 나타내어진다 (Fuchs, 1964).

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = -\beta(v) \cdot n(v, t) \tag{1}$$

여기서,  $n(v, t)$ 는 시간  $t$ 에서의 입자크기분포이고,  $\beta(v)$ 는 부피가  $v$ 인 입자의 침착계수이다. Crump and Seinfeld(1981)는 브라운확산과 난류확산 및 중력침강을 고려한 침착계수에 대한 일반적인 이론을 제시하였다. 그들의 이론에 따르면, 입자의 모양을 가지는 반응기속의 에어로졸에 대한 침착계수는 다음 식으로 표현된다.

$$\beta(v) = \frac{1}{V} \int_{\Sigma} \frac{u_t \mathbf{n}(x) \cdot \mathbf{k} dA(x)}{\exp\left[\frac{\pi u_t \mathbf{n}(x) \cdot \mathbf{k}}{m \sin(\pi/m) \sqrt{k_e D^{m-1}}}\right] - 1} \tag{2}$$

여기서,  $\Sigma$ 는 반응기의 표면을 나타내고,  $V$ 는 반응기 부피,  $u_t$ 는 입자의 종말침강속도,  $\mathbf{n}(x)$ 는 표면에 바깥방향으로 수직인 단위벡터,  $\mathbf{k}$ 는 연직방향 단위벡터,  $dA(x)$ 는  $\Sigma$ 에 대한 차분 면적 요소,  $D$ 는 브라운 확산계수,  $k_e$ 는 난류에너지 분산율로부터 계산되는 상수(Corner and Pendlebury, 1951)이며,  $m$ 은 2와 3 사이의 값을 갖는 상수이다. 입자의 종말침강속도  $u_t$ 와, 브라운 확산계수  $D$ 는 다음과 같은 입자 크기의 함수이다.

$$u_t = \frac{2r^2 \rho g C}{9\mu} \tag{3}$$

$$D = \frac{k_B TC}{6\pi\mu r} \quad (4)$$

여기서,  $r$ 은 입자의 반지름,  $\rho$ 는 입자의 밀도,  $g$ 는 중력가속도,  $k_B$ 는 볼츠만 상수,  $T$ 는 절대 온도,  $\mu$ 는 기체의 점성계수이며,  $C$ 는 미끄럼 보정계수로서 다음과 같이 표현된다 (Fuchs, 1964).

$$C = 1 + \frac{\lambda}{r} \left\{ 1.246 + 0.418 \exp\left(-\frac{0.867r}{\lambda}\right) \right\} \quad (5)$$

여기서,  $\lambda$ 는 기체분자의 평균자유행정이다.

적절한 근사식을 적용하면 식(2)은 다음 식과 같이 정리된다.

$$\beta(v) = A \cdot v^{-2(m-1)/(3m)} + B \cdot v^{2/3} \quad (6)$$

여기서,  $A = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{2(m-1)}{3m}} \left(\frac{1.664\lambda k_B T}{6\pi\mu}\right)^{\frac{m-1}{m}} \left[\frac{m \sin(\pi/m) S^m \sqrt{k_e}}{\pi V}\right]$ ,  $B = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/3} \left(\frac{2\rho g}{9\mu H}\right)$ ,  $S$ 는 반응기 전체 표면적,  $H$ 는 반응기의 높이이다. 식(6)은 모멘트 기법을 적용하기에 적절한 함수형태로 되어있다. 그림 1은  $m=2$ 인 경우에 대해서 식(6)과 Crump and Seinfeld(1981)의 침착계수 방정식인 식(2)를 비교한 것을 보여주고 있다. 이 그림에서 보듯이, 식(6)은 식(2)와 비교할 때, 대체로 상당히 잘 일치함을 알 수 있다.

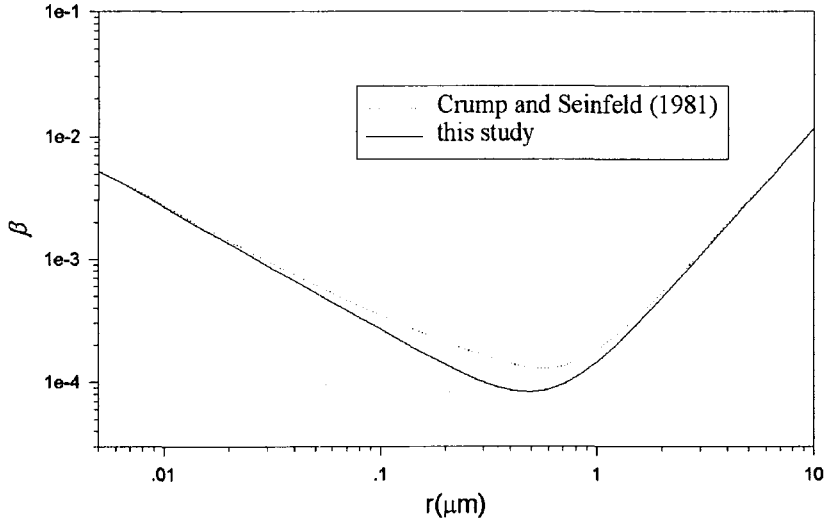


Fig. 1. Comparison of deposition coefficient as a function of particle size

### 3. 대수정규분포이론

부피  $v$ 를 가지는 입자들에 대한 대수정규분포 함수는 다음과 같다.

$$n(v, t) dv = \frac{N(t)}{3\sqrt{2\pi} \ln \sigma(t)} \exp\left[\frac{-\ln^2\{v/v_g(t)\}}{18 \ln^2 \sigma(t)}\right] d(\ln v) \quad (7)$$

여기서,  $N(t)$ 는 전체 입자개수농도,  $v_g(t)$ 는 기하평균부피,  $\sigma(t)$ 는 입자 반지름에 대한 기하표준편차이다. 대수정규분포에서 크기분포 함수  $n(v, t)$ 의  $k$ 번째 모멘트는 다음과 같이 정의된다.

$$M_k(t) = \int_0^\infty v^k n(v, t) dv \quad (8)$$

여기서,  $k$ 는 임의의 실수이다. 모멘트들 중에서,  $M_0$ 는 전체 입자개수농도(=N)를 나타내고,  $M_1$ 은 전체 입자부피농도를 나타낸다.

모멘트기법을 사용하여 식 (1)을  $M_0, M_1, M_2$ 에 관한 식으로 나타내면 다음과 같다.

$$\frac{dM_0}{dt} = - \left( A \cdot M_0 \frac{20m^2 - 13m + 2}{9m^2} M_1 \frac{-16m^2 + 20m - 4}{9m^2} M_2 \frac{5m^2 - 7m + 2}{9m^2} + B \cdot M_0^{2/9} M_1^{8/9} M_2^{-1/9} \right) \quad (9)$$

$$\frac{dM_1}{dt} = - \left( A \cdot M_0 \frac{5m^2 - 7m + 2}{9m^2} M_1 \frac{5m^2 + 8m - 4}{9m^2} M_2 \frac{-m^2 - m + 2}{9m^2} + B \cdot M_0^{-1/9} M_1^{5/9} M_2^{5/9} \right) \quad (10)$$

$$\frac{dM_2}{dt} = - \left( A \cdot M_0 \frac{-m^2 - m + 2}{9m^2} M_1 \frac{8m^2 - 4m - 4}{9m^2} M_2 \frac{2m^2 + 5m + 2}{9m^2} + B \cdot M_0^{5/9} M_1^{-16/9} M_2^{20/9} \right) \quad (11)$$

지배방정식 식(1)은 위의 세 개의 1차 상미분방정식으로 전환되었다. 식 (9)~(11)은 1차 상미분방정식을 계산하기 위한 임의의 수치 알고리즘을 이용하여 계산할 수 있다. 식(9)~(11)을 통해  $M_0, M_1, M_2$ 를 계산한 다음, 다음 두 식을 이용하여  $v_g$ 와  $\sigma$ 를 구한다. 그 결과, 임의의 시간에 대한 크기분포를 식(7)을 이용하여 구할 수 있다.

$$v_g = \frac{M_1^2}{M_0^{3/2} M_2^{1/2}} \quad (12)$$

$$\ln^2 \sigma = \frac{1}{9} \ln \left( \frac{M_0 M_2}{M_1^2} \right) \quad (13)$$

### 참 고 문 헌

- Clark, T. L. (1976) Use of log-normal distributions for numerical calculations of condensation and collection. *J. Atmos. Sci.* **33**, 810-821
- Corner, J. and Pendlebury, E. D. (1951) The coagulation and deposition of a stirred aerosol. *Proc. Phys. Soc.* **B64**, 645-654
- Crump, J. G. and Seinfeld, J. H. (1981) Turbulent deposition and gravitational sedimentation of an aerosol in a vessel of arbitrary shape. *J. Aerosol Sci.*, **12**, 405-415
- Fuchs, N. A. (1964) *The Mechanics of Aerosols*, Pergamon Press, New York
- Lee, K. W., Chen, H. and Gieseke, J. A. (1984) Log-normally preserving size distribution for Brownian coagulation in the free-molecule regime. *Aerosol Sci. Technol.*, **3**, 53-62
- Pratsinis, S. E., Kodas, T. T., Dudukovic, M. P. and Friedlander, S. K. (1986) Aerosol reactor design: Effect of reactor type and process parameters on product aerosol characteristics. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, **25**, 634-642
- Pratsinis, S. E. (1988) Simultaneous nucleation, condensation, and coagulation in aerosol reactors. *J. Colloid Interface Sci.*, **124**, 416-427
- Whitby, E. R. (1985) *Report to the U. S. Environmental Protection Agency*, Department of Mechanical Engineering, University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota.