

PE12) 응집에 의한 이차 에어로졸 생성 모사 Simulation of Secondary Aerosol Formation by Coagulation Process

양소희 · 김영제 · 김순태 · 홍민선
 아주대학교 환경도시공학부

1. 서론

에어로졸의 물리적, 화학적 특성은 주로 입자의 크기 분포와 밀접한 관련이 있다. 따라서 시간에 따른 입자의 크기분포의 변화를 아는 것은 중요한 문제로서, 입자에 작용하는 중력이나, 전기적인 힘, 입자간의 상대속도 등에 의해 입자의 크기분포는 달라질 수가 있다. 이러한 입자간의 상호작용으로 인해서 서로 충돌하여 합쳐지는 것으로 이를 응집(Coagulation)이라 한다.(M.M.R. Williams, 1988)

입자의 응집은 각종 기계공정 및 환경분야에서 일어나게 되며, 입자가 응집함에 따라 달라지는 입자의 크기분포변화는 반응공학, 공정제어, 물질전달, 기상학, 대기오염, 원자력발전소 안전해석, 유체역학, 분진공학등 많은 분야에서 응용이 가능한 아주 기본적인 문제이다. 특히 분진의 크기분포와 농도등은 응집현상과 밀접하게 관련되어 있기 때문에 이를 예측하기 위해서는 응집현상을 일으키는 각종 기작들에 대한 연구가 뒤따라야 한다.(진형아 et al., 1998) 따라서 본 연구에서는 Gas to particle conversion으로 인해 Precursor Gas SO₂, NO₂로부터 형성되는 SO₄²⁻, NO₃⁻ 등의 Secondary aerosol의 응집 메카니즘을 통하여 secondary aerosol의 분포패턴을 알아본다.

2. 연구방법

에어로졸 입자는 직경이 0.01 ~ 100 μ m까지 volume이 두 배씩 되는 41개의 bin을 적용하였다.

Gas to particle conversion을 통하여 발생된 particle은 서로 충돌하면서 합쳐지는 응집현상을 거치게 된다. 응집현상을 거치면서 입자는 크기분포를 달리하게 되는데, 그에 관한 식은 다음과 같다.(I. Y. Lee and M. S. Hong, 1987)

$$\frac{dN_i}{dt} = -N_i \sum_{j=1}^i K_{ij} N_j - K_{ii} N_i^2 + \sum_{j=1}^{i-1} K_{ij} N_i N_j \left(\frac{v_{i+1} - v_i - v_j}{v_{i+1} - v_i} \right) \left(\frac{v_i + v_j}{v_i} \right) + \sum_{j=1}^{i-1} K_{i-1,j} N_{i-1} N_j \left(\frac{v_j}{v_i - v_{i-1}} \right) \left(\frac{v_{i-1} + v_j}{v_i} \right) \quad (1)$$

N_i는 i번째 입자의 number density를 나타내고, K_{ij}는 i와 j번째 입자간의 응집 커널로서 이는 부딪히는 두 입자의 크기의 함수이며, 식 2) 에서처럼 표현된다. 또한 식 1)의 V_i는 i번째 bin의 부피를 나타낸다.

위에서 우변 첫 번째 항은 i번째 입자가 다른 모든 입자와 충돌하여 소멸되는 항이고, 두 번째 항은 같은 크기의 입자끼리 부딪혀서 생기는 항이나 종말속도가 같으면 0으로 계산된다. 세 번째와 네 번째 항은 i번째 입자가 다른 입자의 충돌에 의해 생성되는 항을 나타낸다.

응집커널은 브라운운동에 의한 커널, 중력에 의한 커널값을 합한 값으로 다음과 같이 나타낸다.(F.Butuirat et al., 1996)

$$K_s = 4\pi D_B (a+b) + 12\pi k_e (a+b)^3 + \pi (a+b)^2 V \quad (2)$$

$$V = 2 \frac{\rho_p}{g\mu} \left(3.9 \frac{\epsilon^{3/2}}{\nu^{1/2}} + g^2 \right)^{1/2} |a^2 - b^2|$$

$$D_B = \frac{kT}{6\pi\mu} \left(\frac{1}{a} + \frac{1}{b} \right), \quad K_e = 0.15 \left(\frac{\epsilon}{\nu} \right)^{1/2}$$

- a, b : radii of aerosol particles
- k : Boltzman's constant
- ϵ : turbulent energy dissipation rate per unit mass of gas
- μ : dynamic viscosity,
- ν : kinematic viscosity

3. 결과 및 고찰

Gas to particle의 conversion rate는 여름시기 청정지역의 SO₂ 6%/hr를 근거로 하였다. (V. L. Foltescu et al., 1996) 그림 1은 시간에 따른 입자의 Number density 분포도를 나타내는 것으로 총 24시간을 모사한 것이다. 모사 초기에는 반경이 작은 입자들끼리 응집을 하다가 시간이 흐를수록 반경이 큰 입자로 응집하여 분포하는 것을 알 수가 있다. 그림 2는 입자들의 농도를 시간별로 나타낸 것으로 주로 반경이 0.05 μ m 이하의 입자에서 높은 농도를 나타내었다.

모사 24시간 후 반경이 0.016 μ m 입자의 농도는 2시간일 때 9.22 $\times 10^{-2}$ μ g/m³에서 4.524 μ g/m³으로 증가하였고, 0.1 μ m 입자는 4.72 $\times 10^{-4}$ μ g/m³에서 1.37 $\times 10^{-3}$ μ g/m³으로 증가하였다. 본 연구는 입자의 크기 증가에 따른 중력의 영향을 고려하지 않은바 침강에 의한 제거율을 고려할 시 농도분포는 다르게 나타날 수 있다. 그림 1에서 입자의 개수농도는 입자의 반경이 0.03 μ m일 때 가장 높은 분포를 나타내었고, 질량농도는 그림 2에서 반경이 0.04 ~ 0.05 μ m에서 높게 모사되었다.

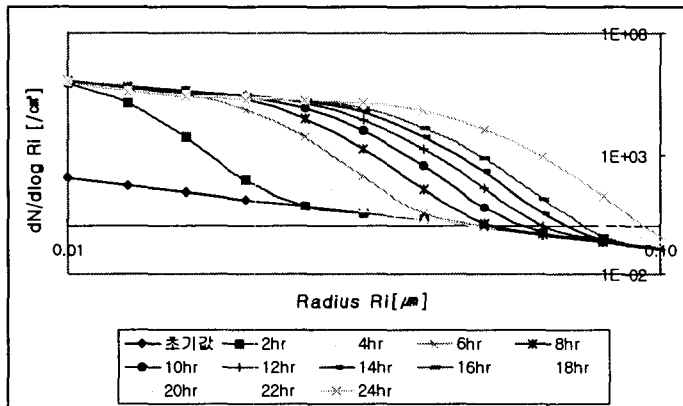


Fig 1. Evolution of coagulating particle size distribution for 24 hrs simulation

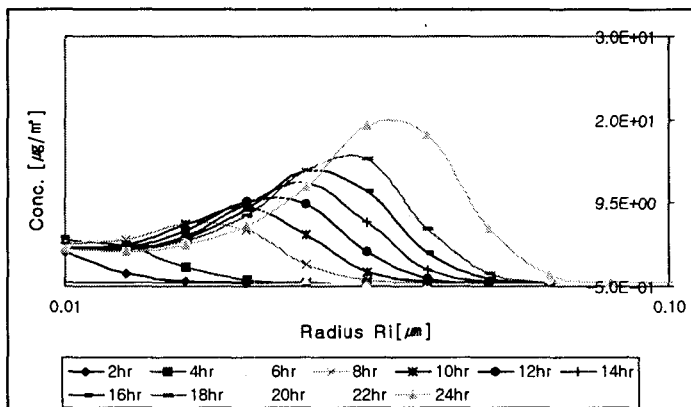


Fig 2. Evolution of coagulating particle mass distribution for 24 hrs simulation

참 고 문 헌

- I. Y. Lee and M. S. Hong(1987) A Review of Parameterization of Microphysical Processes in Clouds for Application in Models of Regional Atmospheric Deposition, Argonne Annual Report
- M.M.R. Williams(1988) A unified theory of aerosol coagulation, J.Phys. D:Appl Phys., Vol 21, 875-886
- F. Butuirat and M.Kielkiewicz(1996) Technical Note On Additivity of Coagulation Kernels Institute of Heat Engineering, Warsaw University of Technology, Vol. 23, No. 13, 1091-1096,
- A.M. Shahub, M.M.R. Williams(1988), The importance of collision efficiency in the coagulation of nuclear aerosol particles, London University, The University of Michigan, Vol. 86, 80-86
- V.L.Foltescu, E. Selin Lindgren, J. Isakson and M.Oblad(1996) Department of Physics, Goteborg University and Chalmers University of Technology, J. M. Pacyna, Norwegian Institute for air Research, S. Benson, Institute of Public and Environmental Health, University of Birmingham, vol. 30, No. 18., 3129-3140
- 진형아, 정장훈, 이규원 (1998) 중력침강에 의한 입자응집의 해석적 연구, 한국대기환경학회, Vol. 14 No. 4, 303-311