

4D4) 연소 에어로졸의 크기 및 형상 예측 모델 개발 Development of a Model to Predict Size and Structure of Soot Particles

박성훈 · S.N. ROGAK¹⁾ · Z. WEN²⁾ · M.J. THOMSON²⁾

광주과학기술원 환경공학과, ¹⁾Mechanical Engineering, University of British Columbia, ²⁾Mechanical and Industrial Engineering, University of Toronto

1. 서 론

산업의 발전과 자동차의 증가로 인해 연소 공정에서의 입자상 오염물질의 배출을 줄이는 것이 대기 환경 보전에 중요한 과제로 자리잡았다. 연소 에어로졸은 복잡한 일련의 화학반응과 응집, 성장의 과정을 거쳐 5~50 nm 크기의 구형 입자나 그 이상의 agglomerate로 자라난다. 대부분의 연소 에어로졸의 질량은 표면성장(surface growth)에 의해 이루어지기 때문에, 기존의 (2-point) fixed sectional method로는 심각한 수치확산(numerical diffusion)을 야기하게 된다. Moving sectional method는 수치확산을 없앨 수 있는 유력한 방법이지만, plug flow reactor에서만 적용할 수 있다는 단점이 있다. 최근 fixed sectional method의 기본 틀을 유지하면서 수치확산을 줄일 수 있는 새로운 에어로졸 모델(adjusted-point fixed sectional model)이 개발되었다(Park and Rogak, 2004). 본 연구에서는 이 모델을 연소 에어로졸의 발생 및 성장의 수치연구에 적용하였다.

2. 연구 방법

본 연구에서는 jet-stirred reactor/plug flow reactor (JSR/PFR) system에서의 rich premixed ethylene/air의 연소에 의한 입자 발생을 수치적으로 모델링하여 Marr et al. (1994)의 실험결과와 비교하였다. 입자상 물질의 질량농도(중력측정법)와 크기분포(TEM)는 PFR에서만 측정되었지만, PFR 초기의 정확한 예측을 위하여 JSR에서의 입자 발생도 계산하였다. Nenniger et al. (1984)에 따르면, 기체상 물질들에 대해서는 JSR이 완전혼합의 특성(CSTR)을 보였다. 그러나, CSTR 가정과 Appel et al. (2000)의 화학 메커니즘을 이용한 에어로졸 모델링의 결과 입자상 물질의 질량이 한 자리수 정도로 과다예측되었으며, PFR 단계에서는 과소예측되었다. 이러한 차이의 원인으로는 JSR 내부에서의 불완전혼합과 pyrene 이외의 PAH 물질의 condensation이 무시된 점을 들 수 있다. JSR 단계를 또 하나의 PFR로 가정하고 표면성장을 5.3의 팩터로 강화시킨 결과 PFR 단계에서의 입자 질량농도와 크기 분포를 실험결과와 유사하게 얻을 수 있었다.

3. 결과 및 고찰

그림 1은 두 번째 단계인 PFR에서 $t = 0, 8.5, 20$ ms에서의 입자크기분포의 예측을 비교하고 있다. 표면성장 모델의 중요성이 그림 1에 잘 나타나 있다. Moving sectional model과 adjusted-point model은 서로 유사한 크기분포를 예측한 데 비해, 2-point model의 예측결과는 25~30% 작은 peak size를 보이고 있다.

본 연구에서 사용된 에어로졸 모델은 각 섹션에서의 primary particle의 population balance를 포함하고 있으며, 표면성장에 의해 primary particle이 서로 합쳐지는 현상을 고려하였다. 본 연구에서는 이론적/실험적으로 입증되지 못한 연소 에어로졸의 sintering을 무시하였기 때문에, primary particle의 크기를 과소예측할 것으로 예상했다. 예측된 primary particle의 크기는 실험결과보다 일관되게 30~40% 작았는데, primary particle 예측을 위해 어떠한 tuning도 가해지지 않았다는 점을 고려할 때, 상당히 긍정적으로 평가된다.

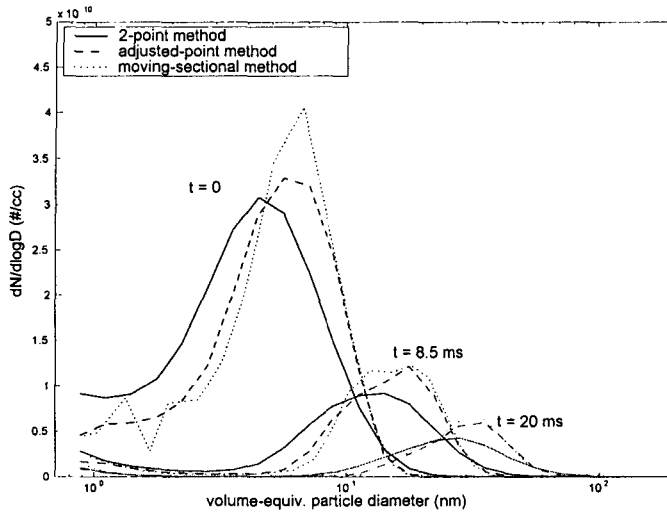


Fig. 1. Comparison of predicted soot size distributions using different sectional methods

4. 결 론

본 연구에서는 새로운 fixed sectional 에어로졸 모델이 연소 에어로졸의 발생 및 성장을 예측함에 있어 moving sectional 모델과 비슷한 정확도를 보임을 확인할 수 있었다. 새로운 모델은 PFR 뿐만 아니라 복잡한 flow에서도 적용할 수 있으며, primary particle의 크기까지도 예측할 수 있기 때문에, 앞으로 이를 다양한 조건에서의 연소 에어로졸 모델링에 사용될 수 있을 것으로 기대된다.

참 고 문 헌

- Appel, J., H. Bockhorn and M. Frenklach (2000) *Combust. Flame* 121:122.
- Marr, J.A., L.M. Giovane, J.P. Longwell, J.B. Howard and A.L. Lafleur (1994) *Combust. Sci. Tech.* 101:301.
- Nenniger, J.E., A. Kridiotis, J. Chomiak, J.P. Longwell and A.F. Sarofim (1984) *Proc. Combust. Inst.* 20:473.
- Park, S.H. and S.N. Rogak (2004) A novel fixed-sectional model for the formation and growth of aerosol agglomerates. *J. Aerosol Sci.* accepted for publication.