한국대기환경학회 1999 추계학술대회 논문집
Proceedings of 29th Meeting of KOSAE (1999) pp. 194~196
Proceedings of Korean Society for Atmospheric Environment

DR16) 대수정규분포의 모멘트 기법을 사용한 응집방정식의 해 - 상계수를 갖는 응집계수의 경우

Moment Method of Log-Normal Size Distribution for Coagulation Problem - Constant Collision Kernel Model

박성훈, 이승주, 이규원
광주과학기술원 환경공학과

1. 서론

대기나 수용액 속에 부유 입자는 서로 충돌하여 합쳐져서 그 크기가 커지게 된다. 이러한 과정을 응집(Coagulation)이라고 하며, 이는 대기중 부유입자의 농도 및 크기분포의 변화, 구름 속에서의 빗방울 형성 등에 매우 중요한 기작 중의 하나이다.

응집방정식은 일반적으로 비선형 편미적분 방정식으로 표현되어 일반 해를 구하는 것은 불가능하다. 이러한 이유로 응집방정식을 풀 때에는 수치 해석적인 방법이 주로 이용되고 있다. (Tolfo,1977; Gelbard and Seinfeld, 1978; Reed et al.,1980; Mick et al., 1991).

모멘트 기법(Moment Method)은 Cohen and Vaughan (1971)에 의해 개발된 이래 에어로졸 동력학 문제를 푸는데 널리 사용되었다. (Lee et al, 1984; Pratsinis, 1988). 모멘트 기법을 이용하여 시간에 따른 입자크기분포의 파라미터들의 변화를 구하고자 할 때 세 개의 모멘트를 선택하여 연립 상미분방정식을 풀게된다. 지금까지는 M_0, M_1, M_2를 선택하는 방법이 주로 사용되어져 왔으나, 일반적으로는 임의의 세 모멘트를 사용하여도 무방하다. 따라서 본 연구에서는 세 모멘트를 선택하는 다양한 방법에 따라 모멘트 기법에 의한 응집방정식의 해가 어떻게 달라지는지 비교하기 위하여 응집계수가 상수인 경우에 대하여 응집방정식의 해석해를 구하였다. 이를 섹션기법(Sectional Method; Landgrebe and Pratsinis, 1990)을 이용한 수치해석 해와 비교하였다.

2. 본론

1) 응집 방정식 (Coagulation Equation)

응집에 의한 입자크기의 분포방정식은 아래와 같이 나타내어질 수 있다.

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} \approx \frac{1}{2}\int_0^v K(v-w,w)\,n(v-w,t)\,n(w,t)\,dw - n(v,t)\int_0^\infty K(v,w)\,n(w,t)\,dw \tag{1}$$

여기서 $n(v,t)$은 시간 t에서 입자의 부피 v 와 $(v+dv)$ 사이의 입자크기의 분포함수이며 $K(v,w)$는 입자부피가 v 와 w인 입자의 충돌커널이다. 따라서 위 식의 우변의 첫째 항은 부피 v-w인 입자와 부피 w인 입자가 만나서 부피 v인 입자가 생겨나는 속도이며, 우변의 두 번째 항은 부피 v인 입자가 다른 모든 부피의 입자들과 만나서 부피 v인 입자군에서 사라지는 속도를 나타낸다.

2) 크기분포함수의 모멘트 (Moment of the Particle Size Distribution)

분포함수 $n(v,t)$의 k차 모멘트는 다음과 같이 주어진다.

$$M_k(t) = \int_0^\infty v^k n(v,t)dv \tag{2}$$

여기서 $M_0(t)$은 전체 입자 수농도(=N), $M_1(t)$은 전체입자의 총 부피농도를 의미한다. 식 (1)의 양변에 v^k을 곱하여 v=0에서 ∞까지 적분한 후 v=w+u로 치환하면 다음 식이 얻어진다.

$$\frac{dM_k}{dt} = \frac{K}{2}\int_0^\infty\int_0^\infty \left[(w+u)^k - w^k - u^k\right] n(w,t)\,n(u,t)\,dwdu \tag{3}$$

이 식에서 k=0, 1, 2, 3, ..., k를 차례로 대입하면 다음과 같은 모멘트방정식을 이끌어 낼 수 있다.

$$\frac{dM_k}{dt} = \frac{1}{2}K\cdot\sum_{i=1}^{k-1}{}_kC_i M_i M_{k-i} \tag{4}$$

여기서 ${}_kC_i$는 이항계수이다. 이를 순서대로 적분하면 다음과 같은 모멘트들의 해석해를 구할 수 있다.

$$M_0(t) = \frac{M_0(0)}{1+KM_0(0)t/2},\ M_1(t) = M_1(0),\ M_2(t) = M_2(0) + KM_1^2(0)t,$$
$$M_3(t) = M_3(0) + 3KM_1(0)\left\{M_2(0)t + \frac{1}{2}KM_1^2(0)t^2\right\},\ \ldots \tag{5}$$

3) 대수정규분포 이론 (Log-Normal Size Distribution Theory)

입자 크기 분포는 특정한 함수의 형태로 가정되어야한다. 이러한 함수의 형태 중 타당성이 가장 널리 인정되어 온 대수정규분포는 다음 식으로 표현된다.

$$n(v,t)dv = \frac{N(t)}{3\sqrt{2\pi}\ln\sigma(t)}\exp\left[\frac{-\ln^2\{v/v_g(t)\}}{18\ln^2\sigma(t)}\right]d(\ln v) \tag{6}$$

여기서 $N(t)$은 시간 t에서 입자들의 전체 수농도, v_g는 입자들의 기하학적 평균부피 값, $\sigma(t)$는 입자반경의 기하학적 표준편차이다. $N(t)$은 식 (5)에서 구한 바 있으므로 v_g와 $\sigma(t)$를 시간의 함수로 구하게 되면, 매 시각 t에서 입자의 크기 분포를 시간의 함수로 나타낼 수 있게된다.

에어로졸 입자들의 각각의 모멘트는 다음과 같이 표현된다.

$$M_k = M_0 v_g^k \exp(\frac{9}{2}k^2\ln^2\sigma) \tag{7}$$

식 (7)에서 알 수 있듯이 모든 모멘트들은 M_0[=N], v_g, σ의 함수이므로, 이들 중에서 세 개만이 서로 독립적이다. 즉 위의 식에 임의의 0이상인 세 정수 값을 대입한 후 서로 연립하면 대수정규분포의 파라미터인 N, v_g, σ를 각각 세 모멘트들의 함수로 나타낼 수 있게된다. 식 (7)에 k=l, m, n (l<m<n)을 차례로 대입하여 연립하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\ln^2\sigma = \frac{2}{9(n-l)(n-m)}\ln\left(\frac{M_l^{(n-m)/(m-l)}M_n}{M_m^{(n-l)/(m-l)}}\right) \tag{8}$$

$$v_g = \frac{M_m^{(n+l)/(m-l)(n-m)}}{M_l^{(n+m)/(m-l)(n-l)}M_n^{(m+l)/(n-l)(n-m)}} \tag{9}$$

3. 결론

본 연구에서 입자크기분포의 파라미터들을 시간에 대한 함수로 구해내는데 사용한 가정은 입자의 크기분포가 계속해서 대수정규 분포를 갖는다는 것이다. 따라서 이 가정을 수치 해석적인 계산을 통해 검증하기 위하여 응집 방정식 (1)을 섹션기법을 이용, 본 연구에서 구한 해석해와 비교하였다.

앞서 구한 식 (5), (8) 및 (9)는 식(1)에 대한 해석해로서 에어로졸 입자의 크기 분포가 정확히 대수정규분포를 이룬다면 0이상의 어떤 세 정수 l, m, n을 선택해도 같은 v_g, σ를 얻을 수 있어야 한다. 그러나 실제로는 에어로졸이 초기에 대수정규 분포를 이루고 있었다고 하더라도 응집이 진행되면서 대수정규분포에서 조금은 벗어나기 때문에 세 정수를 어떻게 선택하느냐에 따라 결과가 조금씩 달라지게 된다. (그림 1, 그림 2, 그림 3). 그림 1, 2, 3으로부터 M_0, M_1, M_2를 선택했을 때의 해가 섹션기법의 해와 가장 잘 일치함을 볼 수 있다.

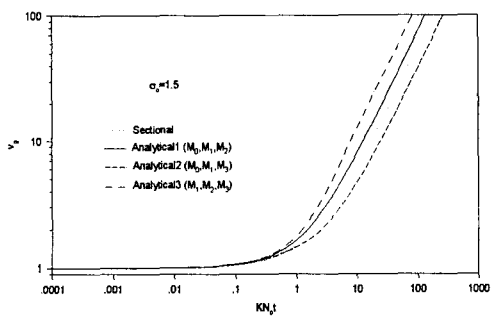

Figure 1 : Comparison of the change of geometric mean volume with a numerical result for σ_g=1.5.

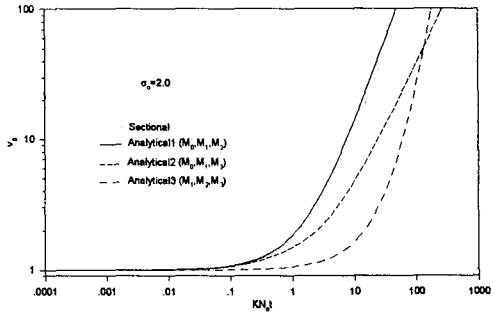

Figure 2 : Comparison of the change of geometric mean volume with a numerical result for σ_g=2.0.

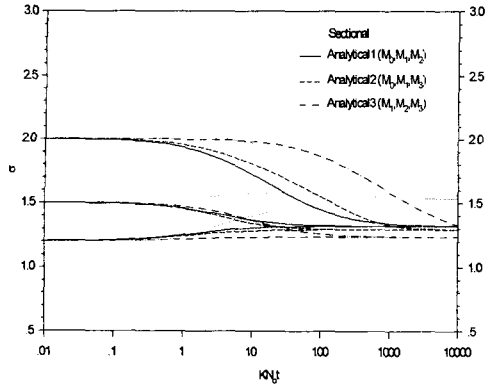

Figure 3 : Comparison of the change of geometric standard deviation with a numerical result for three initial σ values.

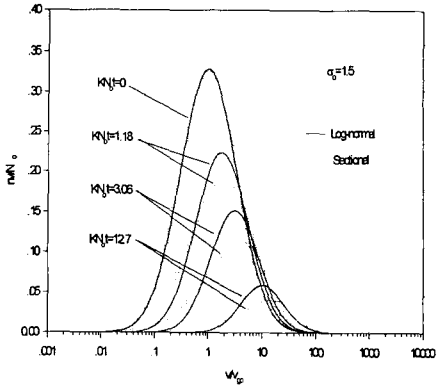

Figure 4 : Comparison of the change of particle size distribution with numerical result for σ_g=1.5

그림 4는 M_0, M_1, M_2를 사용하여 구한 입자크기분포의 변화를 섹션기법을 사용한 수치해석 해와 비교한 것이다.

참고문헌

Cohen, E. R. and Vaughan, E. U. (1971) Approximate solution of the equation for aerosol agglomeration, *J. Colloid Interface Sci.* **25**, 612-623

Gelbard, F. and Seinfeld, J. H. (1978) Numerical solutions of the dynamic equation for particle systems. *J. Comp. Phys.*, **28**, 357-375

Landgrebe, J.D. and Pratsinis, S.E. (1990) A discrete-sectional model for powder production by gas phase chemical reaction and aerosol coagulation in the free-molecular regime. *J. Colloid Interface Sci.* **139**, 63-86.

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

Mick, H. J., Hospital, A. and Roth, P. (1991) Computer simulation of soot particle coagulation in low pressure flames. *J. Aerosol Sci.*, **22**, 831-841

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

Reed, L. D., Lee, K. W. and Gieseke, J. A. (1980) The behavior of contained radioactive suspensions. *Nuclear Sci. & Engg.* **75**, 167-180

Tolfo, F. (1977) A simplified model of aerosol coagulation. *J. Aerosol Sci.*, **8**, 9-19