

**DA3) Modal Dynamics 방법과 광역적 평형 방법을 이용한  
 기체/입자간 물질이동모델 개발  
 Development of Gas/Particle Transport Mechanism  
 using Modal Dynamics Approach with Global  
 Equilibrium Method**

<sup>1)</sup>정창훈 · <sup>2)</sup>김용표 · <sup>1)</sup>이규원

<sup>1)</sup>광주 과학기술원 환경공학과, <sup>2)</sup>이화여자대학교 환경학과

**1. 서론**

대기 중에 존재하는 입자의 생성 및 변화를 모델링 하는데 있어서 가장 중요한 요소는 응축/휘발 (condensation/evaporation)과 같은 기체/입자간의 상호 과정을 어떻게 모사 하느냐 하는 것이다. 일반적으로 지금까지의 연구는 입자와 가스상의 농도가 순간적으로 평형을 이룬다고 가정해 왔으나 실제 대기상의 입자는 비 평형(non-equilibrium)상태의 응축/휘발 과정을 따르는 것으로 알려져 왔다.(Meng et al., 1998) Meng et al.(1998)은 화학평형 모델 SCAPE II(Kim et al., 1993a,b)를 이용하여 이러한 비 평형상태의 응축/휘발 과정을 국지적 평형(local equilibrium) 방법이라 불리는 동역학적 관계(kinetic approach)를 이용, 입경 분포를 sectional 방법을 적용하여 계산하였다. 그러나 위 방법의 경우 비평형 방법에 의한 농도 계산에 있어 stiffness 문제가 발생하며 입경 분포를 sectional 방법을 사용하는 관계로 인해 계산시간이 장시간 소요되는 것이 문제점으로 지적되어 왔다.(Song, 1999) 본 연구에서는 이러한 국지적 평형 방법의 단점을 보완하고자 Song(1999)이 제안한 광역적 평형(global equilibrium) 방법을 sectional 입경 분포가 아닌 modal dynamics 방법으로 적용하였다. 입자 크기 분포는 nuclei mode, accumulation mode, coarse mode의 세 모드 분포를 갖는 다 성분(multicomponent) 에어로졸로 가정하였고 응축/휘발 과정에 의한 성분별, 크기 분포별 변화를 시간에 따라 모사 하였다.

**2. 연구 방법**

국지적 평형방법의 경우, 시간에 따른 농도의 변화는 다음과 같이 나타낸다.

$$\frac{dQ_i}{dt} = k(C_i - C_{i,s}) \quad (1)$$

여기서  $Q_i$ 는  $i$  성분의 입자의 농도,  $C_i$ 는  $i$  성분의 전체 가스상에서의 농도,  $C_{i,s}$ 는 입자 표면에서의 가스상에서의 농도,  $k$ 는 물질 전달 계수다. 이에 비해 광역적 평형 방법 다음과 같이 정의된다.

$$\frac{dQ_i}{dt} = k(Q_{eq} - Q_i) \quad (2)$$

여기서  $Q_{eq}$ 는 입자상의 평형농도이다. modal dynamic 방법의 경우 입자가 대기 중에서 다음과 같은 대수 정규 분포(log normal distribution)를 갖는다고 가정한다.

$$n(\ln d_p, t) = \frac{N}{\sqrt{2\pi \ln \sigma}} \exp\left[-\frac{\ln^2(d_p/d_g)}{2 \ln^2 \sigma}\right] \quad (3)$$

여기서  $d_p$ 는 입자의 직경,  $d_g$ 는 기하학적 평균 반경,  $\sigma$ 는 기하학적 표준편차,  $N$ 은 총 입자 개수 농도이다.  $k$  번째 모멘트를 다음과 같이 정의 하면

$$M_k = \int_0^\infty d_p^k n(d_p) dd_p \quad (4)$$

광역적 평형방법에 의한 응축/휘발 과정을 모사 하는 modal dynamics 관계식을 다음과 같이 구할 수

있다.

$$\frac{dM_{ki}}{dt} = \frac{4k(Q_{eq} - Q_i)}{\rho} \frac{\bar{c} D_v M_{(k-1)i} M_{(k-2)i}}{a c M_{(k-1)i} + 8 D_v M_{(k-2)i}} \quad (5)$$

여기서  $\rho$ 는 입자의 밀도,  $\bar{c}$ 는 운동학적 속도(kinetic velocity),  $a$ 는 accommodation 상수이다.

### 3. 결과 및 고찰

Fig. 1은 초기 황산염의 농도를 일정하게 증가시켜 주었을 때 암모늄이온과 질산염으로 구성된 에어로졸의 성분변화가 시간에 따라 어떻게 변화하는지를 모사해 본 것이다. Fig. 1에서 보듯이 국지적 평형 방법과 광역적 평형 방법에 의한 각 무기 이온(inorganic component)의 성분 농도의 시간에 따른 변화 값이 거의 일치하는 것을 볼 수 있다. 또한 시간이 지나감에 따라 각 농도의 값이 열역학적 평형 값(thermodynamic equilibrium value)에 수렴해 가는 것을 볼 수 있다. 광역적 평형 방법은 계산시간에 있어 국지적 평형 방법에 비해 큰 단축을 가져오게 됨을 알 수 있었다. 실제로 본 연구의 경우 비슷한 정확도의 결과를 도출하는데 있어 광역적 평형 방법은 시간 간격(time step)의 계산에 있어 최고 100여배 이상 빠른 계산 속도를 보였다. 아울러, modal dynamics 방법을 이용함으로써 sectional 방법을 사용했던 기존의 방법에 비해 역시 계산 시간에 있어 큰 절약을 가져오는 것을 알 수 있었다. 이는 modal dynamics 방법과 광역적 평형 방법을 이용한 가스/입자상 변환의 모사가 실제 대기 에어로졸의 성분 변화 모사를 잘 수행할 수 있음을 보여준다. 이와 같은 모델 알고리즘의 개발 및 결과는 앞으로 Models-3와 같은 대기질 모델의 개발 및 연구에 적용될 수 있을 것으로 기대된다.

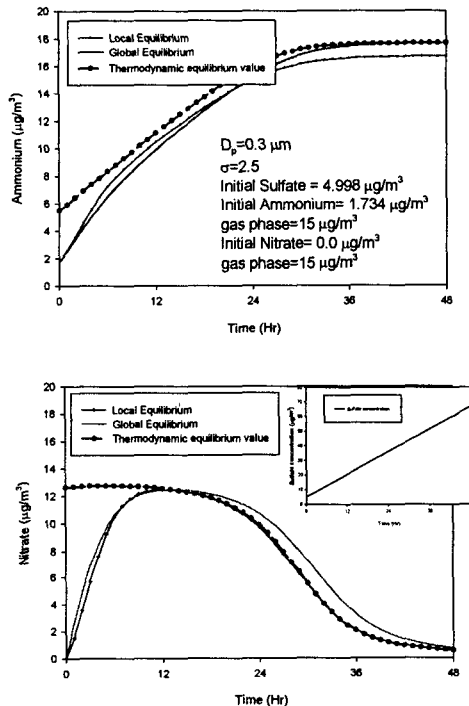


Fig. 1. Comparison of the Equilibrium method between local equilibrium method and global equilibrium method

### 참고문헌

- Kim, Y. P., Seinfeld, J. H., and Saxena, P. (1993a) Atmospheric gas-aerosol equilibrium I, Thermodynamic model, *Aerosol Sci. Technol.*, 19, 157-181.
- Kim, Y. P., Seinfeld, J. H., and Saxena, P. (1993b) Atmospheric gas-aerosol equilibrium, II, Analysis of common approximations and activity coefficient calculation methods, *Aerosol Sci. Technol.*, 19, 182-198.
- Meng, Z., Dabdub, D., and Seinfeld, J. H. (1998) Size-resolved and chemically resolved model of atmospheric aerosol dynamics, *J. Geophys. Res.*, 103, 3419-3453.
- Song, C. H. (1999) Tropospheric aerosols in East Asia: A modeling study of the evolution processes of dust and sea-salt particles during long range transport, Ph. D. Thesis, Dept. of Chemical and Biochemical Eng., Univ. of Iowa, USA.