

Brownian dynamics 를 이용한 입자 포집 모사

방종근[†] · 윤웅섭^{*}

Simulation of particle filtration by Brownian dynamics

Jong-Geun Bang, Yoong-Sup Yoon

Key Words : Filtration, Brownian dynamics, Lattice Boltzmann method

Abstract

In the present study, deposition of discrete and small particles, which diameter is less than 1 μ m, on a filter element was simulated by stochastic method. Trajectory of each particle was numerically solved by Langevin equation and Brownian random motion was treated by Brownian dynamics. Lattice Boltzmann method (LBM) was used to solve flow field around the filter collector and deposit layer. Interaction between flow field and deposit layer was obtained from a converged solution from an inner-loop calculation. Simulation method is properly validated and collection efficiency due to different filtration parameters are examined and discussed. Morphology of deposit layer and its evolution was visualized in terms of the particle size. The particle loaded effect on collection efficiency was also discussed.

1. 서 론

필터를 이용한 미세 먼지의 여과는 편리하고 경제적이므로 에어컨, 자동차 배기 저감 장치, 산업체의 매연 집진 설비 등 다양한 분야에서 널리 사용되고 있다. 필터의 종류가 다양하고 필터의 내부 구조가 복잡하여 필터에 대한 실험적 연구는 포집 효율과 압력 강하 등 필터의 성능에 주로 초점을 맞추고 있다. 이러한 필터의 성능 변수들에 대한 연구는 필터의 사용을 위한 공학적 목적에는 유용하지만 필터 내에서 일어나는 포집 현상에 대한 정보를 제공하지는 못하며 효율적인 필터의 설계와 성능 최적화를 위해서는 필터 내부의 포집 과정에 대한 이해가 중요하다.

여과와 관련된 변수들이 입자의 포집에 미치는 영향을 알아보기 위한 이론적 연구는 오래 전부터 수행되어 왔으며 포집 이론은 필터를 구성하는

최소 단위인 단일 포집기를 기초로 전개되었다. 포집 이론은 입자의 포집을 관성, 간섭, 확산 등 세부 포집 메커니즘(mechanism)으로 나누고 입자의 포집은 이들의 합으로 이루어진다고 가정하여 각 포집 메커니즘 별로 정확한 포집 효율을 구하는데 연구의 초점을 맞춰왔다.[1-2] 하지만 입자의 포집은 여러 가지 물리적 현상들이 동시에 일어나는 과정으로 각 포집 메커니즘 별로 구분하는 것은 인위적인 방법이다. 또한 필터 포집 이론은 포집기 위에 형성된 입자층의 성장과 그에 따른 효과를 고려하지 않고 초기 상태의 필터만 다룬다는 한계를 가지고 있다.

따라서 입자의 운동 방정식을 풀어 각 입자들의 궤적을 계산하고 입자의 포집 과정을 직접 모사하려는 연구가 시도되었다. 초기의 연구는 브라운 운동을 무시하고 지름이 큰 입자를 대상으로 연구가 수행되었지만 Ermak[3]가 몬테카를로 기법을 적용하여 입자의 브라운 운동을 고려하여 입자의 운동 방정식을 처음으로 수치 적분하고 Gutpa[4]가 이를 입자의 전기장 내 입자의 포집에 적용하였다. Ramarao[5]은 Kuwabara 모델을 이용해 유동장 내에서 입자의

[†] 연세대학교 기계공학부
E-mail : deepsky00@naver.com
TEL : (02)2123-4812 FAX : (02)312-2159

^{*} 연세대학교 기계공학부

포집을 모사하고 입자의 포집 효율을 계산하였지만 입자의 포집에 의한 유동장의 변화는 고려하지 못하였다. Lantermann[6]은 입자의 포집에 따른 포집기의 형상 변화와 유동장의 변화를 고려하기 위하여 격자 볼츠만 방법(Lattice Boltzmann method)을 적용하여 입자의 포집 효율을 계산하였으며 본 논문에서는 Lantermann의 방법을 따르고 있다.

본 논문에서는 브라운 동역학을 이용해 입자의 궤적을 계산하고 실린더 모양의 포집기 위에 형성되는 입자 포집층의 형상을 살펴보았다. 또한 포집 효율과 계산하고 이론식과 비교하였으며 포집기 위에 쌓인 입자가 포집 효율에 미치는 영향을 알아보았다.

2. 해석 방법

입자의 여과 과정 중 포집기의 표면에 입자가 부착되면 포집기의 형상과 포집기 주위를 흐르는 유동장이 변한다. 유동장의 변화는 유동장 내 부유 입자의 운동에 영향을 미치며 이는 입자의 포집 과정에 다시 영향을 준다. 이처럼 입자의 여과 과정은 포집기의 형상 변화, 유동장의 변화, 입자의 운동이 서로 맞물려있는 복잡한 과정이며 입자의 포집 과정을 모사하기 위해서는 이들간 상호작용을 고려하여 해석해야 한다. 본 논문에서는 격자 볼츠만 방법을 이용해 포집기 주위의 유동장을 구하고 브라운 동역학을 이용해 입자의 궤적을 계산하였다. 입자의 포집에 의해 포집기의 형상이 달라지면 유동장을 새로 계산하고 새로 계산된 유동장을 이용해 입자의 운동을 계산하여 유동장의 변화와 입자 포집의 상호작용을 고려하였다.

2.1 필터 포집기 주위의 유동장

필터 포집기 위에 포집된 입자는 돌기 모양을 만들며 성장하고 그 형상이 복잡하여 일반적인 전산 유체 방법으로는 포집된 입자 주위를 흐르는 유동장을 해석하기 힘들다. 따라서 복잡한 형상의 물체 주위를 흐르는 유동장을 해석하는데 장점을 가지고 있는 격자 볼츠만 방법을 이용해 필터 섬유와 포집 입자 주위의 유동장을 계산하였다.

격자 볼츠만 방법에서는 균일한 크기의 격자를 이용해 유동장을 해석한다. 필터 섬유에 포집된 입자가 유동장에 미치는 영향을 고려하기 위해서는 포집된 입자의 크기보다 작은 크기의 격자를 사용해야 하는데 계산 영역 전체에 작은 크기의

격자를 사용하면 계산해야 할 격자의 수가 지나치게 많아져 계산 시간이 오래 걸린다. 따라서 Fig. 1 과 같이 계산 영역을 여러 개의 블록으로 나누어 속도 및 압력 구배가 작은 바깥 블록에는 큰 간격의 격자를 사용하여 계산 부하를 줄이고 입자들이 포집되는 중간 블록에는 촘촘한 격자를 주어 해상도를 높였다.[7] 유체는 왼쪽에서 오른쪽으로 흐르고 계산 영역 위와 아래에 배치된 필터 섬유가 유동장에 미치는 영향을 고려하기 위해 위쪽과 아래쪽의 경계에는 주기 경계 조건을 적용하였다.

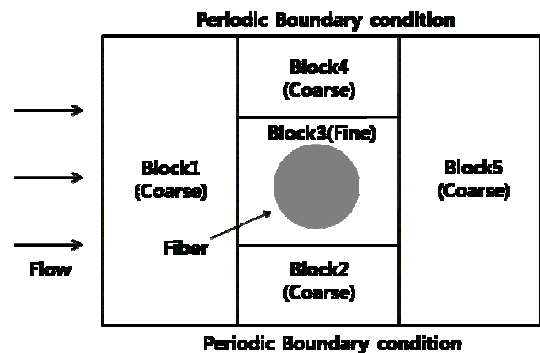


Fig.1 유동장 계산을 위한 블록 배치

2.2 입자의 운동 방정식

일반적으로 입자의 크기는 수 나노 미터에서 수 백 마이크로 미터 사이의 넓은 범위에 걸쳐 분포하며 입자의 크기가 작을수록 입자의 브라운 운동이 활발하고 입자의 크기가 1 μm 보다 클 때는 브라운 운동의 크기가 무시해도 가능할 만큼 작다고 알려져 있다.

브라운 운동을 포함한 입자의 운동은 Langevin 식으로 표현할 수 있으며 이는 뉴턴의 제 2 법칙을 일반화한 식이다.

$$m_p \frac{dv(t)}{dt} = F_{\text{Drag}} + F_{\text{External}} + F_{\text{Brown}} \quad (1)$$

여기서 F_{Drag} , F_{External} , F_{Brown} 은 각각 저항력, 외력, 브라운 운동의 영향을 나타낸다.

운동 방정식의 해를 구하는 방법은 입자의 크기에 따라 두 가지 방법으로 구분되는데 입자의 크기가 1 μm 이상이면 브라운 운동을 고려하지 않아도 되므로 브라운 운동과 관련된 마지막 항을 무시하고 Runge-Kutta 등의 방법을 이용해 직접 미분방정식의 해를 구한다. 입자의 크기가 1 μm 이하로 브라운 운동이 중요한 경우에는 브라운 동역학을 이용해 입자의 운동을 해석한다. 브라운 동역학에서는 짧은 시간 간격 동안 저항력, 외력이 일정하다고 가정하여 운동 방정식의 해를 이론적으로 구하고 브라운 운동의 효과를 통계적

인 방법으로 처리한다.[6]

본 논문에서는 10nm 에서 10 μm 사이의 입자들을 다루고 있으며 브라운 동역학을 이용해 운동 방정식의 해를 구하고 입자의 궤적을 계산하였다.

2.3 입자와 필터 벽면과의 점착력

공기 중 부유 입자와 필터 섬유 표면 또는 필터 섬유 위에 먼저 포집된 입자 간에는 점착력(adhesion force)이 작용한다. 본 논문에서는 입자와 필터를 구와 평면으로 가정하고 Hamaker 방법으로 적분하여 점착력을 구하였다.[8] 여기서 F_{vdw_PS} 는 부유 입자와 필터 표면, F_{vdw_PP} 는 부유 입자와 포집 입자 사이의 힘을 나타낸다.

$$F_{vdw_PS} = \frac{2A}{3} \frac{r_p^3}{d^2(d+2r_p)^2} \quad (2)$$

$$F_{vdw_PP} = \frac{32A}{3} \frac{r_p^6}{d^2(d+4r_p)^2(d+2r_p)^3} \quad (3)$$

Fig. 2 은 계산에 이용된 입자와 필터 사이의 점착력을 그림으로 나타내었다. 입자와 필터 표면 사이의 거리가 멀 때 힘이 거의 작용하지 않지만 거리가 가까워질수록 힘이 기하급수적으로 커진다. 한번 부착된 입자는 다시 떨어져 나가지 않는다고 가정하였다.

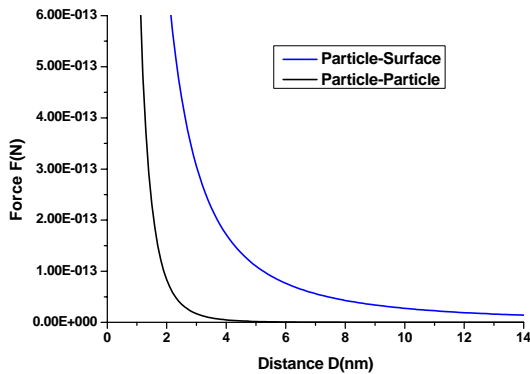


Fig. 2 입자와 필터 벽면의 점착력

3. 해석결과

3.1 입자 확산 계수

각 입자의 브라운 운동은 입자의 확산이라는 거시적 현상으로 나타난다. 따라서 작성된 코드가 입자의 브라운 운동을 제대로 모사하는지 확인하기 위하여 확산 계수를 수치적으로 계산하고 이를 이론 식과 비교하였다. 수치 계산을 위해 유동이나 어떠한 외력의 영향이 없이 브라운 운동에 의해서만 불규칙하게 움직이는 1000 개의 입자들의

변위를 특정 시간 동안 측정하고 이를 식(4)를 이용해 평균하여 입자의 확산계수를 계산하였다.

$$D = \frac{\langle x^2 \rangle}{6\Delta t_{sample}} \quad (4)$$

수치 계산과 비교한 이론 식은 다음과 같다.

$$D = \frac{kTC}{6\pi\mu r_p} \quad (5)$$

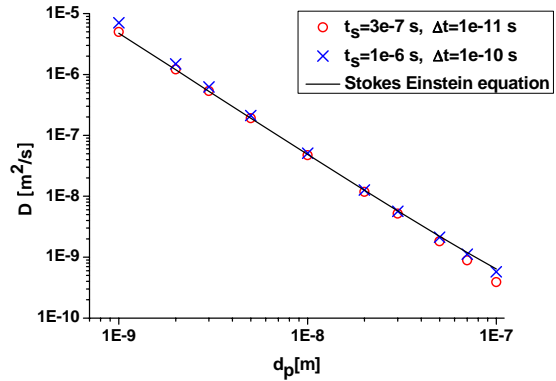


Fig.3 입자의 확산 계수

서로 다른 두 시간 간격에 대해 계산을 수행하였으며 Fig. 3 는 계산한 결과와 이론 식이 잘 일치함을 보여준다. 입자의 크기가 커질수록 브라운 운동의 영향이 작아지고 입자 확산 계수 역시 로그 스케일 상에서 선형적으로 감소한다.

3.2 입자의 궤적 및 포집

입자의 크기에 따라 입자의 궤적과 입자의 포집 과정이 어떻게 달라지는지 알아보았다. 계산은 입자의 지름이 각각 0.01 μm, 0.05 μm, 0.8 μm 의 세가지 경우에 대해 수행하였으며 입구 유속은 0.3m/s, 섬유의 지름은 10 μm 로 세 경우 모두 동일하다. 입자는 필터 섬유의 표면에서 필터 섬유 지름의 2 배 거리만큼 떨어진 곳에 불규칙(random)하게 뿌려주었다.

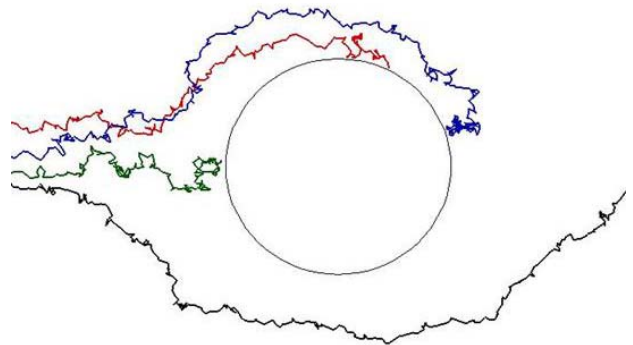


Fig.4 $d_p=0.01 \mu m$ 일 때 입자의 궤적

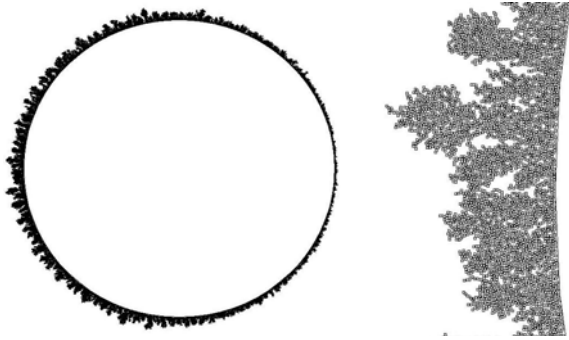


Fig. 5 $d_p=0.01 \mu\text{m}$ 일 때 입자의 포집 형상(좌)과 포집 입자층의 확대 그림(우)

Fig. 4 와 Fig. 5 는 입자의 지름이 $0.01\mu\text{m}$ 일 때 입자의 궤적과 포집층의 형상을 보여준다. 브라운 운동은 매우 활발하여 입자는 순간적으로 유동장과 반대 방향으로 움직이기도 하며 매우 불규칙한 움직임을 보인다. 같은 위치에서 출발한 입자라도 서로 다른 궤적을 가지며 따라서 입자의 포집은 입자의 초기 위치보다 브라운 운동에 더욱 크게 좌우된다. 입자는 브라운 운동의 영향으로 각도에 상관없이 필터의 표면 전체에 포집된다. 하지만 유동 방향의 영향으로 필터의 전면부에 더욱 많은 입자가 포집되며 포집층의 성장속도 역시 전면부가 더욱 빠르다.

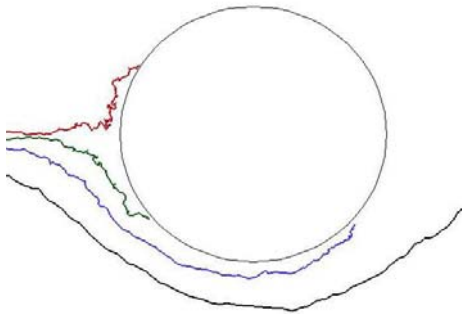


Fig. 6 $d_p=0.05 \mu\text{m}$ 일 때 입자의 궤적



Fig. 7 $d_p=0.05 \mu\text{m}$ 일 때 입자의 포집 형상

입자의 크기가 $0.05 \mu\text{m}$ 로 좀 더 커지면(Fig. 6, 7) 입자의 브라운 운동의 크기는 작아지지만 여전히 눈으로 확인 가능하며 입자는 필터 섬유 후면에도 포집된다. 입자는 포집 초기에 필터의 표면 전체에 비교적 균일하게 포집되다가 필터의 양 옆으로 돌기를 형성하기 시작한다. 형성된 돌기는 주위를 지나가는 입자의 궤적을 방해하여 더욱 더 길게 성장하며 필터 후면에 입자가 포집되는 것을 막는다. 후면에 부착된 입자와 양 옆으로 길게 성장하는 돌기, 필터 전면부의 정체점 근처에 성장한 돌기 등으로 미루어보아 확산, 간섭, 관성의 포집이 비슷한 크기로 발생함을 알 수 있다.

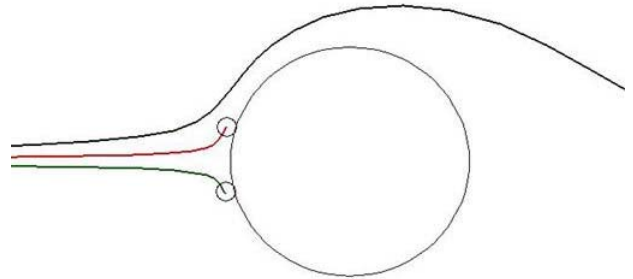


Fig.8 $d_p=0.8 \mu\text{m}$ 일 때 입자의 궤적

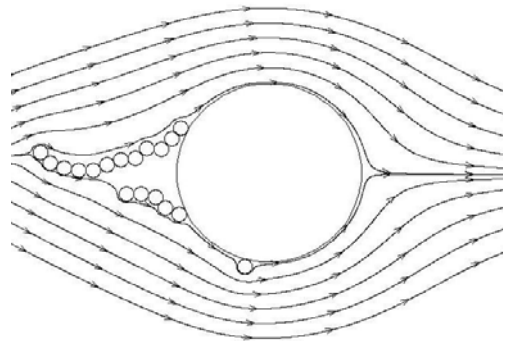


Fig.9 $d_p=0.8 \mu\text{m}$ 일 때 입자의 포집 형상

입자가 $0.8 \mu\text{m}$ 이면(Fig. 8) 입자의 브라운 운동은 무시할 수 있을 만큼 작아지고 입자의 궤적은 입자의 초기 위치에 따라 결정된다. 입자는 간섭과 관성에 의한 영향으로 필터 섬유의 전면부에 긴 돌기를 형성하며 포집된다. 돌기의 성장은 유동장을 교란하고 이는 입자의 포집효율에 영향을 미친다. Fig. 9 는 포집된 입자를 유동장과 함께 나타냈었다. 입자는 2 개의 돌기를 만들며 포집되다가 조금 지나면 긴 돌기 위에만 포집되며 포집층이 성장한다.

3.3 필터 초기 포집 효율

필터의 초기 포집 효율을 구하고 이를 필터의 포집 이론과 비교하였다. 필터 섬유의 크기는 $10 \mu\text{m}$

이며 각 입자 크기 별로 입자의 초기 공간 분포를 바꿔가면 50 번의 계산을 수행하고 이를 평균하여 초기 포집 효율을 계산하였다.

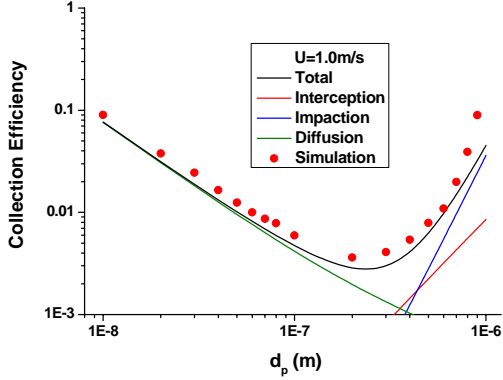


Fig.10 계산과 이론식의 비교

Fig 10. 은 수치 계산을 통해 얻은 입자의 초기 포집 효율과 포집 이론과의 비교를 보여준다. 포집 이론에 의한 포집 효율은 각 포집 메커니즘 별로 포집 효율을 구하고 이를 식 (6)을 이용해 계산하였다.

$$E_{\Sigma} = 1 - (1 - E_R)(1 - E_I)(1 - E_D) \quad (6)$$

여기서 E_R, E_I, E_D 은 각각 간섭, 관성, 확산, 확산에 의한 포집 효율을 나타낸다. 수치 계산을 통해 얻은 포집 효율은 포집 이론을 통해 얻은 값보다 다소 크지만 경향성은 동일하다. 입자의 지름이 작을 때에는 확산에 의한 포집이 지배적이고 확산에 의한 포집은 입자의 크기가 증가하면서 선형적으로 감소한다. 하지만 입자의 크기가 커질수록 간섭 혹은 충돌에 의한 입자의 포집은 증가하므로 포집 메커니즘이 바뀌는 과정에서 필터의 포집 효율은 입자의 크기가 $2 \mu\text{m}$ 근처에서 최소값을 보인다.

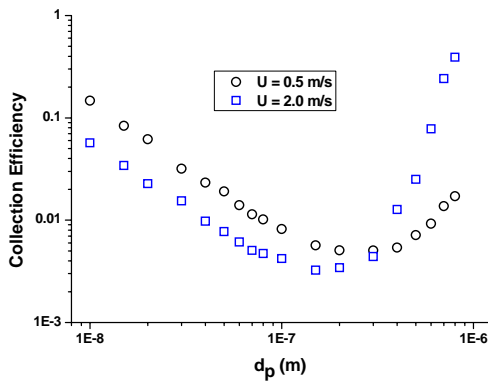


Fig.11 유체의 속도에 의한 영향

Fig. 11 은 유체의 속도가 입자의 포집 효율에 미치는 영향을 알아보기 위해 서로 다른 속도에서 포집 효율을 구하고 비교하였다. 입자의 크기가 작을 때, 즉 확산에 의한 포집이 지배적일 때 포집 효율은 유동의 속도가 증가하면 감소한다. 반면 입자의 크기가 큰 경우 유동의 속도가 증가하면서 관성의 효과가 커져 포집 효율이 증가하며 포집 효율이 최소가 되는 입자의 크기는 유속이 증가하며 왼쪽으로 이동함을 확인할 수 있다..

3.4 포집층 성장이 포집 효율에 미치는 영향

앞서 살펴본 초기 포집 효율은 입자가 포집되지 않은 깨끗한 필터를 대상으로 포집 입자층의 성장을 고려하지 않고 계산하였다. 대부분의 포집 이론과 필터에 관한 연구 역시 포집층의 성장을 고려하지 않고 필터의 초기 상태에 대해서만 수행되어왔다. 따라서 입자층의 성장이 포집 효율에 어떠한 영향을 주는 지 알아보기 위한 계산을 수행하였다.

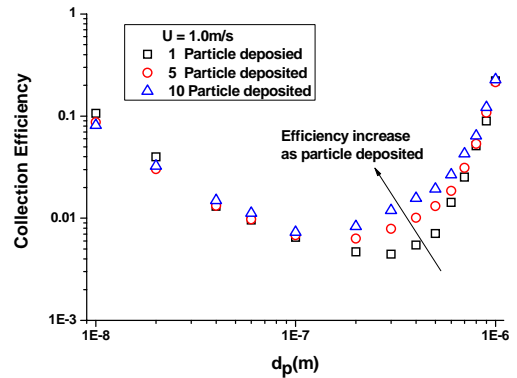


Fig.12 포집층의 형성이 포집효율에 미치는 영향

Fig. 12 는 필터에 포집된 입자의 개수의 증가에 따른 포집 효율의 변화를 나타내었다. 입자의 크기가 작을 때에는 입자가 필터의 표면 전 영역에 고르게 포집되고 포집된 입자의 크기가 작으므로 포집기의 형상 변화 또한 작아서 입자층의 성장이 필터의 포집 효율에 거의 영향을 미치지 않는다. 하지만 입자의 크기가 증가하여 초기 포집 효율이 최소값을 보이는 영역 근처에서는 입자의 포집에 의한 효과가 눈에 띄게 증가한다. 입자의 크기가 더욱 증가하여 관성에 의한 포집이 지배적인 영역에서는 입자의 포집이 포집 효율이 미치는 영향이 다시 감소한다. 이는 초기 포집 효율이 최소값을 나타내는 영역 근처에서는 다른 포집 메커니즘과 비교할 때 간섭에 의한 포집의 영향이 상대적으로 크므로 입자 포집에 의한 포집기의 크기 변화가

간섭에 의한 포집을 증가시켰기 때문으로 판단된다.

Fig. 13 은 입자의 포집에 의해 포집 효율이 얼마나 증가하는지 알아보기 위하여 수행한 결과를 나타낸다. 수평축은 필터 위에 포집된 입자의 양을 질량으로 나타내었으며 수직축은 특정 양의 입자가 쌓인 상태에서의 포집 효율을 초기 포집 효율로 무차원화하여 표현하였다. 계산결과 입자의 포집 효율은 입자가 쌓이면서 선형적으로 증가함을 알 수 있었다.

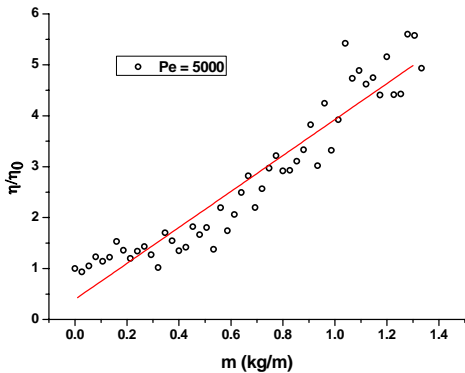


Fig.13 필터의 동적 특성

4. 결론

브라운 운동을 고려한 입자의 궤적을 브라운 동역학을 이용해 계산하여 입자의 포집 과정을 모사하였다. 입자의 포집에 의한 유동장의 변화를 고려하기 위해 격자 볼츠만 방법을 적용하여 유동장을 해석하였으며 입자가 포집되어 포집기의 형상이 바뀌면 유동장을 새로 계산하여 유동장의 변화에 따른 포집 과정의 영향을 고려하였다. 입자의 크기에 따라 어떤 포집 메커니즘이 지배적인가에 따라 입자의 포집 형상은 달라지며 입자의 크기가 커질수록 포집 입자는 긴 돌기를 형성한다. 수치계산을 통해 예측한 포집 효율은 포집 이론과 일치하는 결과를 보여주었으며 입자의 크기가 작을 때는 유속이 느릴수록, 입자의 크기가 클 때는 유속이 빠를수록 포집 효율이 증가한다. 필터에 부착된 포집 입자의 영향으로 포집 효율은 선형적으로 증가하며 초기 포집 효율이 최소값을 가지는 입자 크기 근처에서 그 영향이 크게 나타난다.

참고문헌

(1) Brown, 1993, "Air filtration," *Fergamon press*

(2) Hinds, 1999, "Aerosol technology," *Wiley Interscience*

(3) Ermak and Buckholz, 1980, "Numerical integration of the Langevin equation: monte carlo simulation," *Journal of Computational Physics*, vol. 35, pp. 162-182

(4) Gupta and Peters, 1985, "A Brownian dynamics simulation of aerosol deposition onto spherical collectors," *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 104, pp. 375-389

(5) Ramarao, Chi Tien and Mohan, 1994, "Calculation of single fiber efficiencies for interception and impaction with superposed Brownian motion," *Journal of Aerosol Science*, vol. 25, pp. 295-313

(6) Lantermann and Hänel, 2007, "Particle Monte Carlo and lattice-Boltzmann methods for simulations of gas-particle flows," *Computers & fluids*, vol. 36, pp. 407-422

(7) Yu, D., Mei, R., and Shyy, W., 2002, "A multi-block lattice Boltzmann method for viscous fluid flows," *Int. J. Numerical Methods in Fluids*, vol. 39, pp. 99-120

(8) Elimelech, M., Gregory, J., Jia, X., and Williams, R.A., 1995, "Particle deposition & Aggregation : measurement, modeling and simulation," *Butterworth-Heinemann*