

〈논 문〉

입자가 부유된 고온의 제트유동에서 응집과 부력을 고려한 이차원 입자크기 분포해석

이방원* · 최만수** · 황정호***

(1996년 4월 4일 접수)

A Two Dimensional Analysis of the Evolution of the Particle Size Distribution in Particle Laden High Temperature Jet Flows Including the Effects of Coagulation and Buoyancy

Bang Weon Lee*, Mansoo Choi** and Jungho Hwang***

Key Words : Particle Size Distribution(입자크기분포), Coagulation(응집), Flame-Synthesis of Materials(화염을 이용한 물질제조)

Abstract

A numerical study has been done on the evolution of particle size distribution in particle laden high temperature jet flows undergoing convection, diffusion, thermophoresis and coagulation. The dynamic behavior of these particles have been modelled by approximating the particle size distribution by a lognormal function throughout the process and the moments of the particle size distribution have been used to solve the general dynamic equation. The size distributions of spherical particles in the radial and axial direction have been obtained including the effect of buoyancy. Of particular interests are the variations of geometric mean diameter, number concentration and polydispersity. Results show that buoyancy significantly alters the size distribution in both axial and radial direction. One dimensional analysis for non-spherical particles has also been done and the results have been compared with the existing experimental data.

기 호 설 명

C : SiCl_4 수농도

D : 입자의 확산계수

D_f : Fractal dimension

d_p : 입자의 직경

E_a : SiCl_4 산화 활성화 에너지 (402kJ/mol)

k : Reaction rate of SiCl_4

k_0 : Preexponential Arrhenius rate constant
($1.7 \times 10^{14}/\text{s}$)

k_B : 볼츠만 상수 (1.38×10^{-16} J/K)

Kn : Knudsen 수

$M_{0,m}$: 토치 출구에서의 입자 수농도 (1.7×10^{17} 개/
 cm^3)

M_k : 입자크기 분포함수의 k 번째 모멘트

n : 입자크기 분포함수

Pe : Peclet 수

r : 반경방향 좌표

r_0 : SiO_2 분자의 등가반경 (4.35 Å)

$r_{1/2}$: Jet half radius

R_c : 제트의 입자 분사반경 (0.2cm)

R_j : 제트의 반경 (1cm)

*서울대학교 대학원 기계공학과

**회원, 서울대학교 기계공학과

***회원, 연세대학교 기계공학과

- R_g : 일반기체 상수
 R_L : 반경방향 계산영역
 Re_c : 레이놀즈수 $\left(\frac{u_{max} 2R_L}{\nu}\right)$
 T : 온도
 u_{max} : 중심축의 속도
 x : 축방향 좌표
 X_c : 무차원 좌표 $\left(\frac{x}{2R_L} Re_c^{-1}\right)$
 ν : 입자의 부피
 v_g : 기하평균부피
 v_{go} : SiO₂ 분자의 초기부피
 W : 다분산도 $\left(\sqrt{\exp(\ln^2 \sigma) - 1}\right)$

그리스문자

- β : 충돌빈도함수
 x : 열영동계수 (0.55)
 λ : 평균 자유경로
 μ : 점성계수
 ρ : 밀도
 σ : 입자크기분포의 표준편차
 ξ : 0차 모멘트의 응집계수
 ζ : 2차 모멘트의 응집계수

하첨자

- C : 연속체영역 (continuum region)
 FM : 자유분자영역 (free molecular region)
 P : Particle

1. 서 론

입자가 부유된 고온의 제트유동은 화염을 이용한 미세입자 제조공정에서 볼 수 있다. 이 공정은 고순도를 필요로 하는 광섬유 및 광도파로 제조 등에 응용되고 있고 OVD (outside vapor deposition) 공정과 VAD (vapor axial deposition) 공정,⁽¹⁾ 또는 FHD (flame hydrolysis deposition)⁽²⁾ 등이 있다. 화학반응으로 생성된 미세한 입자들은 유동을 따라 이동하면서 충돌에 의한 응집 (coagulation)으로 입자의 크기가 0.1 μ m 정도로 커지며 입자들은 온도 구배에 의한 열영동력 (thermophoretic force)을 받아 부착판에 부착된다. 입자크기 분포는 증착률과 부착층의 균일도에 직접적인 영향을 미치며 후속공정인 소결에도 영향을 미친다. 본 연구에서는 화학

반응으로 생성된 입자가 대류, 확산, 열영동 그리고 응집에 의해 어떻게 성장하는지, 즉 입자크기 분포 (particle size distribution)의 2차원적인 변화를 수치적으로 해석하고자 한다.

입자크기 분포해석의 기존의 연구로는, Lee⁽³⁾가 모멘트모델 (moment model)을 이용하여 연속체영역 (continuum regime)에서 브라운응집 (Brownian coagulation)에 의한 입자크기분포의 1차원적인 해석해를 구하였으며 Pratsinis⁽⁴⁾는 연속체영역과 자유분자영역 (free molecular regime)을 모두 포함하는 전 입자크기영역에서 입자의 대수정규분포를 가정하여 nucleation, 응축 (condensation) 그리고 응집을 고려한 수치해석 모델을 제시하였다. Kim과 Pratsinis⁽⁵⁾는 MCVD (Modified Chemical Vapor Deposition) 모재 제조 공정에서 원관 내에서 완전 발달한 층류유동을 가정하여 확산, 화학 반응 그리고 응집을 고려한 2차원 입자크기분포와 증착률, 증착효율을 수치 해석하였다. Biswas 등⁽⁶⁾은 고온의 aerosol reactor에서 입자 생성과 성장에 관한 실험과 1차원 해석을 수행하였으며 Bai와 Biswas⁽⁷⁾는 OVD 공정의 해석에 응용할 수 있는 실린더 외부유동에 대하여 입자의 확산, 열영동 (thermophoresis), 입자응집을 고려한 경계층 해석을 통하여 증착률과 증착효율을 예측하였다. Chang과 Biswas⁽⁸⁾는 메탄-공기 예혼합화염에서의 입자크기 분포를 angular dissymetry를 이용한 산란방법으로 측정하였는데 이들은 입자를 구형으로 가정하고 ELS 기법 (Elastic Light Scattering technique)을 이용하여 단분산 입자와 다분산 입자분포에 대하여 측정된 결과를 DMPS (Differential Mobility Particle Sizer)로 측정된 결과와 비교하였다. 조장호 등⁽⁹⁾은 원판으로의 다분산입자 부착에 관하여 경계층 근사를 이용하여 응집효과를 고려한 입자크기 분포와 증착률, 증착효율을 해석하였다. 응집으로 성장하는 입자가 구형 (sphere)이 아닌 기본 입자들 (primary particles)의 집합체 (agglomerates)인 경우 구형 입자와는 다른 입자 성장 현상을 보이는데 자유분자영역과 연속체영역에서 agglomerate가 구형의 입자보다 응집이 강화된다고 보고되고 있다.^(10,11,12)

본 연구에서는 실리카 구형 입자에 대해서 대류, 확산, 응집 그리고 열영동을 포함한 2차원 제트유동에 관한 입자크기 분포해석을 수행하였으며 집합체인 경우에 대해서는 1차원 해석을 수행하였으며

기존의 실험결과와 비교하였다.

2. 이 론

2.1. 구형입자에 대한 입자역학방정식

본 연구에서는 축대칭 원형제트에 대해 연속방정식, 운동량방정식, 에너지방정식을 수치해석하여 유동장과 온도장을 계산하고 입자역학방정식(General Dynamic Equation for Particles)을 해석하여 축방향과 반경방향으로 변화하는 입자크기분포를 구하였다. 유동장과 온도장의 해석에서 밀도, 열전달계수와 점성계수의 온도에 따른 변화를 고려하였

으며⁽¹³⁾ 유동해석결과와 Rankin 등⁽¹⁴⁾의 실험결과와 비교하여 Fig. 2에 나타낸 바와 같이 잘 일치함을 파악하였다.

입자의 체적분율이 10^{-3} 보다 작을 때에는 희박 입자를 가진 기체의 유동으로 가정할 수 있다. 본 연구에서는 체적분율이 7.45×10^{-6} 으로써 희박입자를 가진 기체의 유동으로 가정하였으며 유동 및 대류열전달과 관련된 기체의 물성치는 입자의 존재로 인하여 영향을 받지 않는다고 가정하였다. 입자의 속도와 온도는 기체와 평형을 이룬다고 가정하였다. 이 가정이 의미하는 것은 속도의 경우에 확산과 열영동에 의한 입자의 이동이 없을 경우에는 입

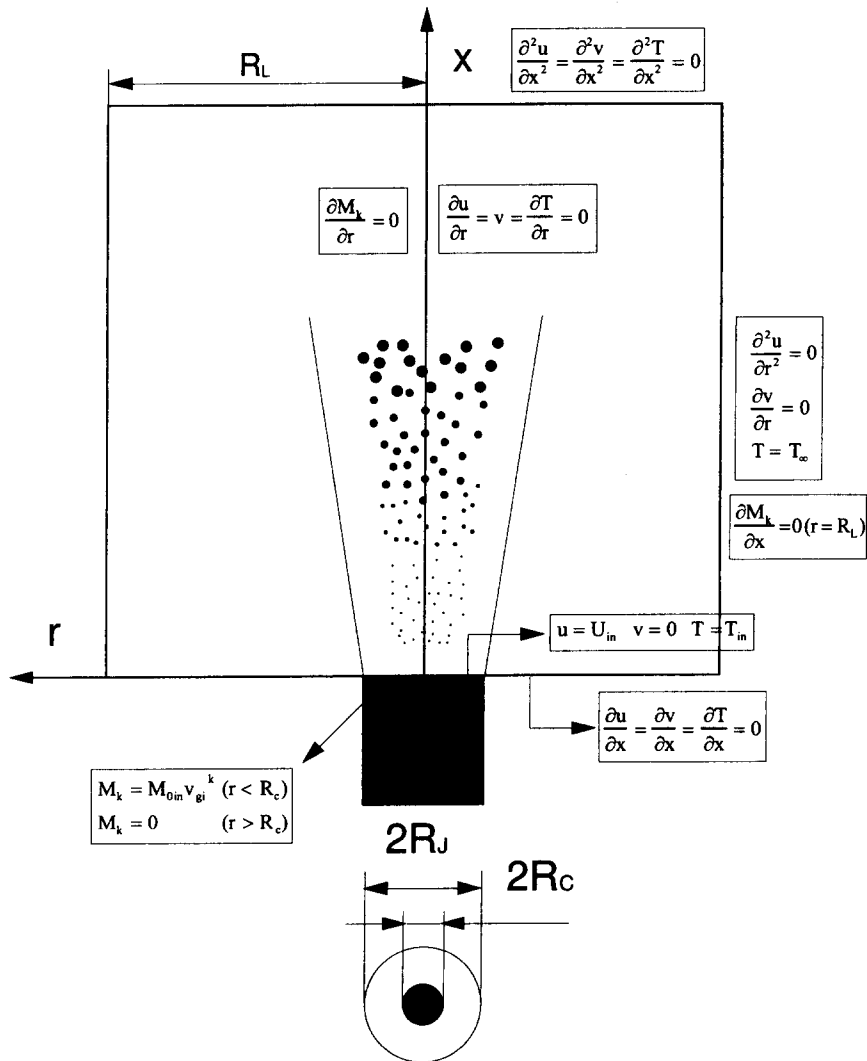


Fig. 1 Geometry and boundary conditions

자들은 국소적인 기체의 속도를 가지고 이동하며, 입자의 온도 또한 기체의 국소온도와 같다는 것을 의미한다. 본 연구에서 기체유동의 특성시간에 대하여 $1\mu\text{m}$ 입자의 속도 및 온도가 기체유동에 적응하는 시간의 비는 각각 7.2×10^{-8} , 7.2×10^{-9} 으로 매우 작으므로 이러한 가정이 타당하다고 할 수 있다.⁽¹⁵⁾ 본 연구에서 고려하는 레이놀즈수는 46.5로 작고 제트유동의 출구 근처의 포텐셜 코어영역에 한정된 부분에서 해석을 수행하므로 층류유동으로 가정하였다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v) &= 0 \\ \rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial r} \right) &= -\frac{\partial P}{\partial x} \\ &+ \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\tau_{xr}) - \rho g \\ \rho \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial r} \right) &= -\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{\partial \tau_{rx}}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\tau_{rr}) \\ &- \frac{\tau_{\theta\theta}}{r} \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= \mu \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right] \\ \tau_{rr} &= \mu \left[2 \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right] \\ \tau_{\theta\theta} &= \mu \left[2 \frac{v}{r} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right] \\ \tau_{xr} &= \tau_{rx} = \mu \left[\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial x} \right] \\ \nabla \cdot \vec{v} &= \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(rv) \\ \rho C_p \left(u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial r} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(rk \frac{\partial T}{\partial r} \right) \end{aligned}$$

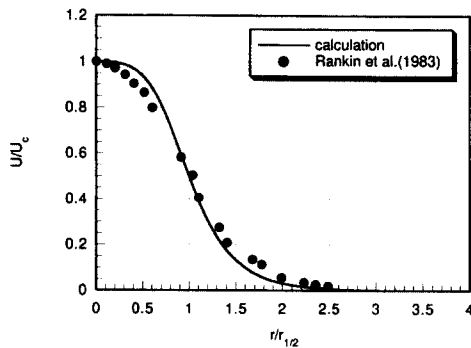


Fig. 2 Non-dimensional axial velocity profile $X_c=0.005$

입자 부피가 v 와 $v+dv$ 사이인 입자들에 관하여 대류, 확산, 열영동 그리고 응집을 고려한 2차원 입자역학방정식은 다음과 같다.⁽¹⁶⁾

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial x}(un) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(rvn) \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(rD \frac{\partial n}{\partial r} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left(x\nu \frac{\partial \ln T}{\partial x} n \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(rx\nu \frac{\partial \ln T}{\partial r} n \right) \\ &+ \frac{1}{2} \int_0^v \beta(\bar{v}, v - \bar{v}) n(\bar{v}) n(v - \bar{v}) d\bar{v} \\ &- \int_0^\infty \beta(\bar{v}, v) n(\bar{v}) n(v) d\bar{v} \end{aligned} \quad (1)$$

여기에서 $Pe_m = 2R_j U_{in}/D \gg 1$ 이므로 축방향 확산은 무시하였으며 n 은 입자크기 분포함수(particle size distribution function)이다. 위 식에서 우변의 첫번째 항은 확산으로 인한 항이며 확산계수 D 는 입자크기의 함수로써 다음과 같이 쓸 수 있다.⁽¹⁶⁾

$$\begin{aligned} D &= \frac{k_B T}{3\pi\mu} \left(\frac{1}{d_p} + \frac{2\lambda}{d_p^2} \left(1.257 \right. \right. \\ &\left. \left. + 0.4 \exp\left(-\frac{0.55d_p}{\lambda} \right) \right) \right) \end{aligned} \quad (2)$$

여기에서 d_p 는 입자의 직경, λ 는 평균자유경로(mean free path)이며 μ 는 유체의 점성계수이다. 우변의 둘째 항과 셋째 항은 열영동에 의한 입자이동에 관련된다. 본 연구에서 고려하는 열영동계수(thermophoretic coefficient) x 는 입자크기의 함수로 주어지나 본 연구에서의 입자의 크기에 해당하는 $1\mu\text{m}$ 이하의 작은 실리카 입자구간에서는 0.55로 거의 일정한 것으로 알려져 있으므로⁽¹⁷⁾ 상수로 가정하였다. 우변 넷째 항은 작은 두 입자의 충돌에 의한 부피 v 인 입자의 생성률을 의미하고, 다섯째 항은 입자 부피 v 인 입자와 다른 크기의 입자가 충돌하여 더 큰 입자를 생성시킴으로써 결과적으로 부피 v 인 입자의 손실률을 의미한다. 본 연구에서는 브라운운동의 결과로 발생하는 입자 충돌로 인한 입자응집을 고려하였으며, 충돌빈도함수(collision frequency function)는 연속체영역과 자유분자영역에 따라 아래와 같이 주어진다.⁽⁴⁾

연속체영역

$$\begin{aligned} \beta_c &= \frac{2k_B T}{3\mu} \left(\frac{B(v)}{v^{1/3}} + \frac{B(\bar{v})}{\bar{v}^{1/3}} \right) (v^{1/3} + \bar{v}^{1/3}) \\ B(v) &= 1 + 1.257Kn \end{aligned} \quad (3)$$

자유분자영역

$$\beta_{FM} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/6} \left(\frac{6k_B T}{\rho_p}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{v} + \frac{1}{\bar{v}}\right)^{1/2} (v^{1/3} + \bar{v}^{1/3})^2 \quad (4)$$

여기에서 $B(v)$ 는 Cunningham 수정계수⁽⁴⁾이다.

이상의 입자역학방정식 해석의 어려움은 입자의 크기가 $10^{-4}\mu\text{m} \sim 1\mu\text{m}$ 으로 매우 큰 범위에 걸쳐 입자가 존재하므로 모든 크기의 입자의 분포를 알려면 수많은 입자역학방정식을 풀어야 한다는 점이다. 이러한 어려움을 해결하기 위하여 모멘트모델^(3,4)을 사용하며 모멘트모델에 의한 방법과 같다.

모멘트모델에서는 입자크기 분포함수 n 의 입자부피에 대한 모멘트 M_k 는 다음 식으로 쓸 수 있다.

$$M_k = \int_0^\infty n v^k dv \quad (5)$$

즉, 입자역학방정식에 v^k 을 곱하고 적분하여 n 대신 M_k 가 종속변수인 방정식을 만들고 이를 해석하게 되는 것이다. 이러한 모멘트모델을 사용하기 위해서는 먼저 입자확산계수와 충돌빈도함수가 적분 가능한 형태로 근사되어야 하며, 입자크기 분포함수가 특정한 함수로 가정되어야 한다. 입자확산계수와 자유분자영역에서의 충돌빈도함수는 다음과 같이 근사할 수 있다.⁽⁵⁾

$$D = \frac{k_B T}{3\pi\mu} \left(\frac{1}{d_p} + \frac{3.314\lambda}{d_p^2}\right) \quad (2')$$

$$\beta_{FM} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/6} \left(\frac{6k_B T}{\rho_p}\right)^{1/2} b \left(\frac{1}{v^{1/2}} + \frac{1}{\bar{v}^{1/2}}\right) (v^{1/3} + \bar{v}^{1/3})^2 \quad (4')$$

여기에서 b 는 표준편차의 함수로 주어지는 계수이다.⁽⁵⁾

모멘트모델을 사용하기 위해서는 입자크기분포를 알려진 함수로 가정하여야 하며 여러 실험결과로부터 입자크기분포는 대수정규분포(lognormal distribution)로 근사할 수 있음이 알려져 있다.⁽¹⁸⁾

$$n(v) = \frac{N}{3\sqrt{2\pi} \ln \sigma} \exp\left[-\frac{\ln^2(v/v_g)}{18 \ln^2 \sigma}\right] \frac{1}{v} \quad (6)$$

여기에서 N , v_g , σ 는 각각 입자 수농도, 기하평균부피, 표준편차이며 앞의 모멘트와 연관하여 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$N = M_0, \quad v_g = \frac{M_1^2}{(M_0^3 M_2)^{1/2}} \\ \ln^2 \sigma = \frac{1}{9} \ln\left(\frac{M_0 M_2}{M_1^2}\right) \quad (7)$$

입자크기 분포함수를 결정하는 N , v_g , σ 는 위치에 따라 변화하며 식 (7)에 나타낸 바와 같이 M_0 , M_1 , M_2 로 계산할 수 있으므로 M_0 , M_1 , 그리고 M_2 에 대한 모멘트방정식들을 해석하여야 한다.

대수정규분포 함수를 입자역학방정식에 대입하고 적분하면 다음과 같은 2차원 모멘트방정식을 얻을 수 있다.

$$\frac{\partial}{\partial x} (u M_k) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v M_k) \\ = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r B_1 \frac{\partial}{\partial r} (D_k M_k) \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left(x v \frac{\partial \ln T}{\partial x} M_k \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r x v \frac{\partial \ln T}{\partial r} M_k \right) \\ + S_k \quad (8)$$

여기에서

$$S_k = -\xi M_0^2 \quad (k=0) \\ 0 \quad (k=1) \\ 2\zeta M_1^2 \quad (k=2) \quad (9)$$

$$B_1 = \frac{k_B T}{\mu (162\pi^2)^{1/3}} \quad (10)$$

이며, ν 는 유체의 동점성계수이다. 본 연구의 관심영역은 연속체영역과 자유분자영역에 걸쳐 있으므로 브라운 응집계수와 관련된 계수인 ξ 와 ζ 는 두 영역에서 구한 값의 조화평균을 취하였다.⁽⁵⁾ (ξ_{FM} , ξ_c , ζ_{FM} , ζ_c 는 부록 참조)

$$\xi = \frac{\xi_{FM} \xi_c}{\xi_{FM} + \xi_c} \quad (11)$$

$$\zeta = \frac{\zeta_{FM} \zeta_c}{\zeta_{FM} + \zeta_c} \quad (12)$$

2차원 해석에서는 화학반응에 의한 입자 생성항을 포함시키지 않고 토치출구에서 입자들이 생성된다고 가정하였다. 이러한 가정의 타당성을 검증하기 위하여 화학반응을 고려한 1차원 해석도 수행하였으며 화학반응으로 인한 영향이 토치출구에서 가까운 구간에서만 중요하고 그외의 넓은 구간에서는 화학반응을 고려하지 않은 경우와 일치함을 얻을 수 있었다. 이에 관하여 3장에서 상세하게 검토, 논의할 것이다.

2차원 모멘트방정식을 해석할 때 필요한 경계조

건으로 토치출구($x=0$ 에서 SiCl_4 기체가 분사되는 구간, $0 < r < R_c$)에서는 부피가 v_{go} 인 단분산 입자가 생성된다고 가정하였으며 그 외의 구간에서는 생성되는 입자가 없으므로 아래에 나타낸 바와 같이 $M_k=0$ 인 조건을 사용하였다. 대칭축과 측면유입영역($r=R_L$)에서는 1차 미분이 영인 조건을 사용하였으며 측면유입영역에서는 $M_k=0$ 인 조건을 사용하여도 결과에 큰 영향이 없음을 확인하였으며 R_L 을 증가시킨 경우에도 큰 영향이 없었다.

토치출구

$$\text{입자분사영역} \quad M_k = M_{oin} v_{go}^k \quad (13)$$

$$\text{입자미분사영역} \quad M_k = 0 \quad (14)$$

$$\text{측면유입영역, 대칭축} \quad \frac{\partial M_k}{\partial r} = 0 \quad (15)$$

2.2. Agglomerate에 대한 1차원 입자역학방정식

고온에서는 입자의 유합(coalescence)이 충분히 빠르게 진행되므로 구형입자의 가정이 타당하지만 낮은 온도에서는 기본입자의 집합체인 agglomerate가 형성된다.^(8,9,10) agglomerate의 부피는 아래와 같이 표현된다.⁽¹¹⁾

$$\frac{v}{v_{go}} = \left(\frac{r}{r_0}\right)^{D_f} \quad (16)$$

여기에서 r_0 는 기본입자의 반경, $v_{go} = \frac{4}{3}\pi r_0^3$ 이며 D_f 가 fractal dimension이다. $D_f \leq 3$ 이며 $D_f = 3$ 이면 구형입자이다.

동일한 부피의 agglomerate에 대해서 fractal dimension에 따라 충돌 단면적이 달라지므로 충돌 빈도함수에 영향을 미친다.^(10,11)

$$\beta_c = \frac{2k_B T}{3\mu} \left(\frac{B(v)}{v^{1/D_f}} + \frac{B(\bar{v})}{\bar{v}^{1/D_f}} \right) (v^{1/D_f} + \bar{v}^{1/D_f}) \quad (17)$$

$$\beta_{FM} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/D_f - 1/2} \left(\frac{6k_B T}{\rho_p}\right)^{1/2} r_0^{2-6/D_f} \left(\frac{1}{v} + \frac{1}{\bar{v}}\right)^{1/2} (v^{1/D_f} + \bar{v}^{1/D_f})^2 \quad (18)$$

대수정규분포와 표준편차는 다음과 같이 바뀐다.

$$n(v) = \frac{N}{D_f \sqrt{2\pi} \ln \sigma} \exp\left[-\frac{(\ln v - \ln v_g)^2}{2D_f^2 \ln^2 \sigma}\right] \frac{1}{v} \quad (19)$$

$$\ln^2 \sigma = \frac{1}{D_f^2} \ln\left(\frac{M_0 M_2}{M_1^2}\right) \quad (20)$$

브라운 응집계수와 관련된 ξ_{FM} , ξ_c , ζ_{FM} , ζ_c 는 부록에 있으며 화학반응의 영향을 파악하기 위하여 화학반응을 포함시킨 1차원 입자역학방정식은 아래와 같다.

$$\begin{aligned} U \frac{dM_0}{dx} &= kC - \xi M_0^2 \\ U \frac{dM_1}{dx} &= kC v_{go} \\ U \frac{dM_2}{dx} &= kC v_{go}^2 + 2\zeta M_1^2 \end{aligned} \quad (21)$$

여기에서 C 는 SiCl_4 의 입자수 농도로서 화학반응과 관련된 $U \frac{dC}{dx} = -kC$ 를 해석하여 구할 수 있으며 $k = k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{R_g T}\right)$ 이다. v_{go} 는 화학반응으로 생성된 실리카 SiO_2 입자의 초기부피이며 이는 분자의 등가직경(equivalent diameter, 4.35 \AA)으로부터 구할 수 있다.⁽⁶⁾

2.3 수치해석방법

1차원 모멘트방정식의 해석방법으로는 4th-order Runge-Kutta 방법으로 해석하였다. 2차원 모멘트방정식의 해석에 있어서는, 축방향의 확산을 무시하고(2.1절 참조) 중앙차분도식을 사용하였으며 반경방향은 대류와 확산을 고려하여 명승 도식을 사용하였다.⁽¹⁹⁾ 수렴판정은 각 격자점에서의 해의 변화율이 10^{-4} 이하이면 수렴한 것으로 하였다. 격자계는 축방향과 반경방향으로 비균일한 격자계를 사용하였다. 격자계에 따른 수렴해의 의존성을 파악하기 위하여 여러 격자계를 사용하여 계산하였으며 그 결과들을 비교하였다. 토치출구에서는 조밀한 격자를 사용하였고 하류로 갈수록 점차 격자 간격을 크게 하는 비균일 격자계를 사용하였으며 최소 $\Delta x = 10^{-6} \text{ cm}$ 이고 최대 $\Delta x = 10^{-3} \text{ cm}$, 10^{-4} cm , $5 \times 10^{-5} \text{ cm}$, 10^{-5} cm 등 네 가지 격자계에 대하여 계산을 수행한 결과 그 차이가 미미함을 파악하였다. 반경방향으로는 변화량이 큰 부분인 $r = 0.5 \times R_c$ 에서 R_c 까지 많은 격자를 두었으며 $r = R_c$ 이상에서는 점차로 격자간격을 크게 하여 최대는 10^{-3} cm 로 정하였다. 반경방향 격자수를 1178개, 1470개, 2210개, 2963개, 3868개로 증가시키면서 M_0 , M_1 , M_2 의 변화를 검사한 결과 2210개에서 2963개로 증가시켰을 때 최대 4% 정도였으며 2963개에서 3868개로 증가시켰을 때 최대 2% 정도였다. 본 연구의

모든 계산은 축방향 간격은 10^{-4} cm, 반경방향 총 격자 개수는 2210개로 수행하였다.

3. 결과와 토의

3.1. 실리카 구형입자의 2차원 크기분포해석

3.1.1. 부력의 영향

부력의 영향을 파악하기 위하여 동일한 토치출구 조건 ($U_{in}=61.35$ cm/s, $T_{in}=2000$ K)에서 부력을 포함한 경우와 포함하지 않은 경우의 계산을 수행하였다. Fig. 3에 여러 다른 축방향 위치(x)에서 기하평균직경의 반경방향분포를 나타내었으며 왼쪽의 결과는 부력이 포함된 경우이고 오른쪽의 결과는 부력이 포함되지 않은 경우이다. 토치출구에서는 $r=0.2$ cm 이내에만 입자가 분사되며 축방향으로 진행하면서 반경방향으로 확산되는 것을 볼 수 있으며 입자 응집의 영향으로 토치에서 먼 구간으로 갈수록 평균직경이 커지고 있음을 확인할 수 있다. 반경방향으로의 분포를 살펴보면 중심축에서 어느 정도까지는 일정한 입자의 크기를 가지는 구간이 존재하며 그 이후 급격하게 감소되어 $r=0.5$ cm 보다 큰 구간은 거의 영에 도달한다. 부력을 고려하지 않은 경우에 하류로 갈수록 중심에서 바깥으로 향하는 반경방향 대류로 인하여 좀더 넓은 구간에서 큰 입자들이 존재함을 볼 수 있다. 반경방향의 유동속도를 살펴보면 부력을 고려하지 않은 경우는 양의 값을 가져 중심에서 바깥으로 이동되며 부력을 고려한 경우는 음의 값을 가져 유입된다. 부력을 고려한 경우 중심축에서의 축방향 속도가 매우 커지며 이에 따라 반경방향으로 유입되는 속도가 존재한다. 이와 같이 유입되는 속도는 열영동에 의한 입자의 이동속도와 반대방향이고 크기는 매우

커서 입자는 중심축 쪽으로 이동하게 된다. 상류에서는 유입되는 속도가 작아 대류로 의한 입자크기 분포의 변화가 적어 부력을 고려하지 않은 경우와 차이가 없게 되지만 하류로 갈수록 반경방향으로 유입되는 속도가 커져서 입자들이 중심축 쪽으로 대류이동하여 부력 없이 계산한 경우보다 더 좁은 구간에서만 큰 입자가 존재한다. $x=5$ cm일 때 중심축에서의 평균입자크기는 부력을 고려한 경우 $0.117\mu\text{m}$, 부력을 고려하지 않은 경우 $0.144\mu\text{m}$ 로 부력을 고려하지 않은 경우가 23% 더 크게 예측하고 있다.

Fig. 4에는 여러 축방향 위치에서 반경방향에 따른 입자의 수농도 분포를 나타내고 있다. 식 (2)에서 보듯이 입자의 확산계수는 d_p 혹은 d_p^2 에 반비례하므로 입자의 확산은 입자의 크기가 작을수록 크게 된다. 즉, 작은 입자들이 많이 존재하는 토치출구 근처에서는(화학반응을 고려하지 않은 경우에) 응집과 함께 입자의 확산이 입자크기분포를 결정하는 중요한 요인이 되고 입자가 점차 커져서 하류로 갈수록 입자응집과 대류이동에 의해 입자크기분포가 결정된다. 강한 확산으로 토치출구로부터 0.1cm에서 이미 반경방향으로 상당히 넓은 구간에 걸쳐 많은 수의 입자가 존재한다. 수농도의 분포에 있어 중심축보다 반경 0.2cm 근처에서 최대값을 나타내는데 이 지점에서의 기하평균직경은 매우 작고 다분산도는 매우 크다(Fig. 3, Fig. 5). 상류(토치출구)에서는 작은 입자들이 확산으로 인하여 중심축에서 반경방향으로 이동하고 $r=0.2$ cm 부근으로 이동된 작은 입자들이 축방향대류로 인하여 하류 쪽으로 이동되며 전 구간에서 응집으로 인하여 수농도가 감소되므로 $r=0.2$ cm 근처에서 수농도가 최대가 나타나는 것으로 생각된다. 부력을 고려한 경우의 입자 수농도의 분포를 보면 수농도가 최대

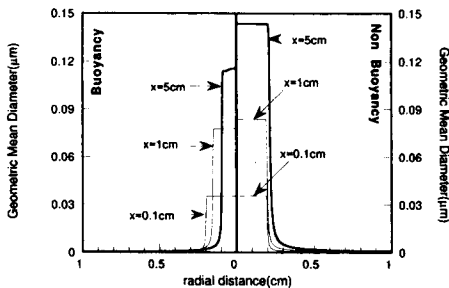


Fig. 3 Evolution of geometric mean diameter distribution

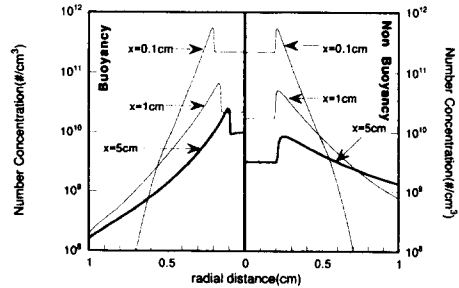


Fig. 4 Evolution of number concentration distribution

가 되는 지점이 하류로 갈수록 안 쪽에서 나타나며, 또한 반경방향을 따라 입자의 수농도의 변화가 거의 없는 영역(그림에서 평평해 보이는 부분)이 하류로 갈수록 부력을 고려하지 않은 경우보다 좁아지고 있다. 이는 기하평균직경의 분포에서 설명한 바와 같이 입자들이 반경방향의 유입되는 유동을 따라 중심 쪽으로 대류이동하기 때문이다. 부력을 고려한 경우에도 하류에서의 입자크기분포를 결정하는 요인으로는 입자응집과 대류이동임을 알 수 있다. $x=5\text{cm}$ 일 때 중심축에서의 수농도는 부력을 고려한 경우보다 부력을 고려하지 않은 경우가 68% 정도 더 작게 예측함을 알 수 있다.

Fig. 5에서 다분산도의 분포를 나타내었는데, 다분산도의 정의는 기호설명에 나타낸 바와 같이 $W = \sqrt{(\exp(\ln^2\sigma) - 1)}$ 이다.⁽⁵⁾ 반경방향에서 다분산도가 최대가 되는 지점은 $r=0.2\text{cm}$ (입자가 분사되는 토치반경, R_c)보다 약간 바깥 쪽에 존재하였다. 또한 다분산도의 최대값이 하류에서 더 크게 나타났다. 이는 입자응집에 의한 효과라기 보다는 속도장과 연관되어 나타난 결과라고 보여진다. 부력을 고려하지 않은 경우, 상류의 작은 입자들이 축방향대류에 의해서 하류로 전달되고 또 하류에서는 중심에서 바깥 쪽으로 반경방향의 대류에 의해 큰 입자들이 전달되어 다분산도의 값이 커지게 되된다. 부력을 고려한 경우도 부력을 고려하지 않은 경우와 마찬가지로 하류로 갈수록 큰 값을 가지는 구간이 존재하지만 이 구간이 부력을 고려하지 않은 경우와는 달리 하류로 갈수록 중심축 쪽으로 이동하고 있다. 즉 상류에서 축방향 대류이동에 의해 하류로 전달된 작은 입자들과 입자응집에 의해 성장한 큰 입자들의 일부가 중심축 쪽으로 이동하게 되어 이 구간에서는 크고 작은 다양한 크기의 입자가 존재하게 되어 다분산도가 큰 값을 보이고 있다.

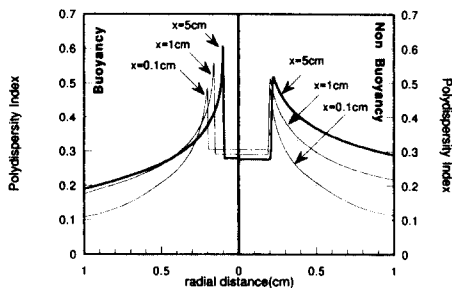


Fig. 5 Evolution of polydispersity index distribution

3.1.2. 토치출구속도와 온도의 영향

분사되는 속도와 온도에 따른 반경방향과 축방향 입자크기분포의 변화에 관하여 고찰하였다. 분사속도가 작을수록 동일한 거리를 지나는 시간이 길게 되므로 입자응집시간이 커진다. 즉 입자 응집이 더 활발하게 되므로 입자의 기하평균직경은 더 커지며 입자 수농도는 더 줄어들게 된다. Fig. 6에서 알 수 있듯이, 동일한 분사온도 2000K에서 분사속도를 30.67cm/s, 61.35cm/s, 122.7cm/s로 변화시켰을 때 중심선을 따라 토치출구로부터 5cm 떨어진 지점에서 각각 $0.129\mu\text{m}$, $0.117\mu\text{m}$, $0.102\mu\text{m}$ 로 감소하였다. 부력을 포함시켜 계산을 수행한 결과이다. 이에 따라 입자의 수농도는 분사속도가 작을수록 더 낮은 값을 보였다. 또한 높은 분사온도는 브라운 운동을 활발하게 한다. Fig. 6에 나타내었듯이 입자의 평균 크기를 비교해 보면 분사속도가 61.35cm/s로 동일하고 분사온도가 2000K일 때 하류 5cm에서 $0.117\mu\text{m}$, 분사온도가 2200K일 때는 $0.119\mu\text{m}$ 로 약간 커졌으며 입자 수농도도 약

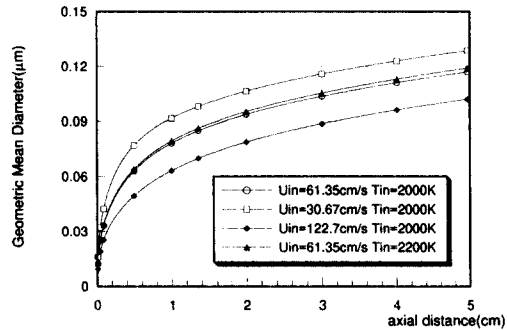


Fig. 6 Axial variation of geometric mean diameter for different conditions at torch exit at $r=0$

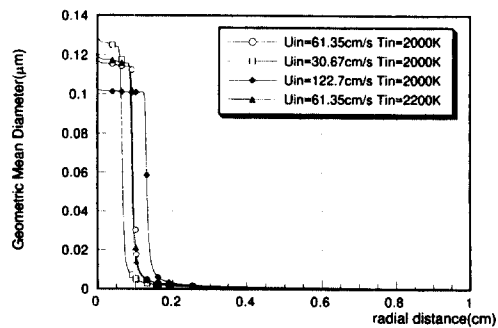


Fig. 7 Radial variation of geometric mean diameter for different conditions at torch exit at $x=5\text{cm}$

간 줄었다.

Fig. 7에 토치출구조건에 따른 반경방향의 기하 평균직경의 분포를 나타내었다. 부력으로 인하여 축방향 속도가 증가하고 그에 따라 유입되는 반경 방향의 속도에 의해 좁은 구간에서만 $0.1\mu\text{m}$ 이상의 입자들이 분포하고 있다. 이러한 이유로 토치출구 속도가 작은 경우가 큰 경우보다 큰 직경의 입자들이 나타났다. 또한 토치출구 속도가 큰 경우에 좀더 넓은 구간에서 $0.1\mu\text{m}$ 이상의 입자가 존재하는데 $x=5\text{cm}$ 만큼 이동하는데 필요한 시간이 작아 반경방향의 유입영향이 적어지기 때문이다.

3.2. 집합체의 영향

기본 입자의 집합체인 agglomerate의 영향을 파악하기 위하여 fractal dimension, D_f 를 바꾸어 가며 1차원 해석을 수행하였으며 $D_f=3$ 인 경우(즉 구형입자인 경우)는 화학반응을 포함시킨 경우도 계산하였다. 3.1절의 2차원 해석은 $D_f=3$ 인 경우에 대하여 수행되었으며, 1차원 해석결과와 중심축에서 결과와 동일하였다. 화학반응에 의해 생성된 실리카 입자는 처음에는 매우 작고 수농도가 높으므로 활발한 입자응집이 일어나게 되어 입자의 크기가 급격히 커지게⁽⁸⁾ 되는데 Fig. 8에서도 이를 확인할 수 있었다. Fig. 8에 나타낸 레이저의 산란을 이용한 입자크기 분포측정결과는 Chang과 Biswas가 입자크기 분포함수를 대수 정규분포로 가정하여 측정된 결과이기 때문에 N , v_g , σ 를 구하기 위해서 산란된 빛의 강도를 세 방향, 즉 60° , 90° , 120° 에서 측정하였다. 단분산 입자로 가정하면 두 방향에서의 실험결과로부터 N , v_g 를 구할 수 있다. Chang과 Biswas는 90° - 120° 와 60° - 90° 의 실험결과를 이용하였다. 토치출구로부터 0.5cm 이후에는 입자의 크기 성장이 둔화되는 것으로 나타났으며 실험결과

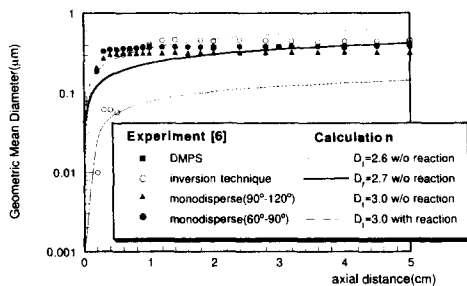


Fig. 8 Comparison of geometric mean diameter with Experimental data

와 일치하였다. 이와 같이 하류에서 입자 크기의 성장이 둔화되는 즉 입자응집이 적은 이유는, 입자 응집은 입자의 수가 많을수록 그리고 다분산도가 클수록 활발하게 일어나므로 하류에서는 입자의 수가 적고 다분산도가 작아지기 때문이다. 화학반응을 고려한 경우와 고려하지 않은 경우를 비교하여 보면 토치출구에서 가까운 구간을 제외하면 예를 들면 $x=0.5\text{cm}$ 이후에는 거의 차이가 없어 2장에서 언급하였던 것처럼 2차원 해석에서는 화학반응을 포함시키지 않고 계산을 수행하였다. 또한 실제의 입자가 구형($D_f=3$)이 아닌 agglomerate임을 고려한 계산으로 fractal dimension을 바꾸어 가며 계산하였다. Chang과 Biswas⁽⁸⁾는 실험을 통하여 D_f 는 입자의 유합시간(time for coalescence)에 따라 토치출구 1cm에서 2.17, 토치출구 5cm에서 2.80 정도로 변하는 것으로 밝혔으며 이 값들은 실험조건과 입자의 종류에 따라 달라진다고 보고하고 있다. 본 연구에서는 D_f 를 각각 2.6, 2.7, 3.0으로 변화시키면서 실험과 비교하였다. D_f 가 작을수록 입자의 응집이 강화되어^(10,11,12) 계산결과에서는 상류에서는 $D_f=2.6$ 이, 하류에서는 $D_f=2.7$ 이 비교적 잘 일치하는 것으로 나타났다.

Fig. 9은 축방향 위치에 따른 입자 수농도의 변화를 나타내고 있다. 실험과 수치해석 모두에서 토치출구 근처에서는 활발한 입자응집으로 입자의 수농도가 급격히 감소하는 경향을 보이며 하류로 갈수록 완만한 감소 추세를 보이고 있는데 이는 앞에서 설명한 입자 응집물의 변화에 의한 것이다. 입자의 수농도 분포에 있어서도 $D_f=2.6$ - 2.7 인 agglomerate가 구형 입자로 가정한 계산결과보다 실험결과에 더 접근함을 보여주고 있으나 다소의 차이를 보이고 있다. 기존의 모델링에서는 입자응

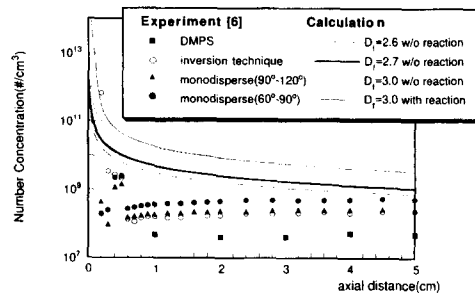


Fig. 9 Comparison of number concentration with experimental data

집에 있어서 다른 요인, 예를 들면 van der Waals 인력에 의한 응집의 강화나 입자의 비구형성 등에 대한 고려가 부족하였다. 본 연구에서는 fractal dimension을 도입하여 입자의 비구형성은 고려할 수 있었으나 입자간 인력은 고려하지 못하였으며 유동장의 결정에서도 화학반응 효과 등이 고려되지 않아 실험결과와의 차이가 나타난 것으로 생각되며 또한 Fig. 9에 나타낸 바와 같이 여러 다른 실험방법으로 측정된 결과들이 차이를 보여주고 있어 측정방법의 개선도 중요한 연구과제가 될 것으로 사려된다. 또한 여러 실험방법으로 측정된 결과들이 서로 차이를 보이고 있다. 그러나 실험과 해석에 있어서 모두 입자의 성장 경향은 일치하고 있다. Fig. 10에서는 다분산도의 변화를 나타내었는데 토치출구에서 큰 값을 보이다가 하류로 가면서 점근 값을 보이고 있다. 토치출구에서는 화학반응에 의해 작은 크기의 실리카 입자들이 생성되고 활발한 입자응집으로 인해 커진 입자들도 존재하므로 입자의 크기가 넓은 범위에 걸쳐 존재하게 되지만 하류에서는 화학반응이 종결되어 새로이 생성되는 작은 크기의 입자는 없어지고 단지 입자응집으로 큰 입자로 성장하게 되므로 다분산도의 값이 줄어들게 된다. 즉 토치출구 근처의 입자크기분포를 결정하는 요인으로는 화학반응과 입자응집이며 하류에서는 입자응집이 주된 요인이 되는 것으로 파악할 수 있다. 실험과 비교하여 보면 토치출구 1cm 이내에서는 차이를 보이고 있지만 하류로 갈수록 실험과 잘 일치하고 있다. 입자크기분포의 다분산도는 fractal dimension이 작아짐에 따라 약간 큰 값을 보이며 그 차이는 하류에서 다소 줄어들었다. 이는 주로 작은 입자가 분포하는 토치출구에서는 자

유분자영역으로써 D_f 가 작아지면 충돌 단면적 (collision cross-area)이 커지므로 응집이 강화되며, 상대적으로 연속체영역인 하류에서는 입자의 drag이 커져 응집이 강화되는 정도가 작게 되기 때문이다.^(8,10) 화학반응을 고려한 경우와 고려하지 않은 경우(이 경우에는 실리카 분자의 등가직경을 가지는 단분산 입자가 토치출구에서 순간적으로 생성된다고 가정하였다.)의 입자의 기하평균직경, 입자 수농도 그리고 다분산도를 비교하면 토치출구 근처에서는 차이를 보이고 있으나 0.5cm 이후에서는 일치하고 있다. 이를 기초로 2차원 해석에서는 화학반응을 포함시키지 않고 입자의 대류, 확산, 응집을 고려한 해석 모델을 이용하였다

4. 결 론

본 연구에서는 부력과 응집으로 변화하는 입자 크기분포를 구하고자 유동장, 온도장과 입자 역학 방정식을 2차원적으로 해석하였고 비구형 입자인 집합체(agglomerate)인 경우에는 1차원 해석을 수행하여 이를 기존의 실험결과와 비교하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 2차원 해석을 통하여 축방향과 반경방향으로 변화하는 입자크기분포를 구하였으며 부력을 고려한 경우는 고려하지 않은 경우에 비해 축방향 속도가 커져서 입자응집시간이 줄어들게 되어 입자 성장이 느리고, 반경방향 유동속도의 방향이 반대로 되어서 입자의 수농도, 기하평균직경, 다분산도의 분포에 큰 영향을 줄을 알 수 있었다.

(2) 토치출구 속도와 온도의 영향을 고찰한 결과, 출구속도가 커지면 입자의 응집시간이 줄어들게 되어 입자의 성장이 더디게 되며 출구온도가 높아지면 활발한 분자운동으로 응집이 더욱 활발하여 성장이 빨라짐을 알 수 있었다.

(3) fractal dimension을 변화시켜 agglomerate에 대한 1차원 해석을 수행하였으며 실험결과와 비교하여 본 결과 $D_f=2.6-2.7$ 에서 구형입자모델보다 실험과 더 잘 일치함을 알 수 있었다.

후 기

본 연구의 일부는 한국과학재단의 지원(과제번호 : 95-0502-08-01-3)에 의해 수행되었으며 이에 깊은 감사를 드립니다.

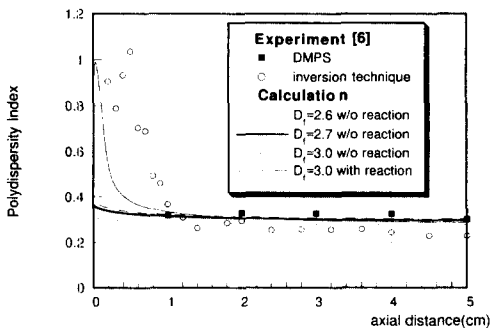


Fig. 10 Comparison of polydispersity index with experimental data

참고문헌

- (1) Li, T., 1985, *Optical Fiber Communication*, Academic Press
- (2) Kawachi, M., Yasu, M. and Edahiro, T., 1983, "Fabrication of SiO₂-TiO₂ Glass Planar Waveguide by Flame Hydrolysis Deposition," *Electronics Letters*, Vol. 19, pp. 583~584.
- (3) Lee, K. W., 1983, "Change of Particle Size Distribution during Brownian Coagulation," *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 92, pp. 315~325.
- (4) Pratsinis, S. E., 1988, "Simultaneous Nucleation, Condensation, and Coagulation in Aerosol Reactors," *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 124, pp. 416~427.
- (5) Kim, K. S. and Pratsinis, S. E., 1988, "Manufacture of Optical Waveguide Preforms by Modified Chemical Vapor Deposition," *AIChE J.*, Vol. 34, pp. 912~921.
- (6) Biswas, P., Li, X. and Pratsinis, S. E., 1989, "Optical Waveguide Preform Fabrication: Silica Formation and Growth in a High-Temperature Aerosol Reactor," *J. Appl. Phys.*, Vol. 65, pp. 2445~2450.
- (7) Bai, H. and Biswas, P., 1990, "Deposition of Lognormally Distributed Aerosols Accounting for Simultaneous Diffusion, Thermophoresis and Coagulation," *J. Aerosol Sci.*, Vol. 21, pp. 629~640.
- (8) Chang, H., and Biswas, P., 1992, "In Situ Light Scattering Dissymmetry Measurements of the Evolution of the Aerosol Size Distribution in Flames," *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 153, pp. 157~166.
- (9) 조장호, 황정호, 최만수, 1995, "포크너-스캔 경계층유동에서의 다분산 입자부착에 관한 연구," 대한기계학회논문집, 제19권, 제9호, pp. 2342~2352.
- (10) Vemury, S. and Pratsinis, S. E., 1995, "Self-Preserving Size Distributions of Agglomerates," *J. Aerosol Sci.*, Vol. 26, pp. 175~185.
- (11) Matsoukas, T. and Friedlander, S. K., 1991, "Dynamics of Aerosol Agglomerate Formation," *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 146, pp. 495~506.
- (12) Wu, M. K. and Friedlander, S. K., 1993, "Enhanced Power Law Agglomerate Growth in the Free Molecular Regime," *J. Aerosol Sci.*, Vol. 24, pp. 273~282.
- (13) Cebeci, T. and Bradshaw, P., 1984, *Physical and Computational Aspects of Convective Heat Transfer*, Spinger-Verlag, New York.
- (14) Rankin, G. W., Sridhar, K., Arulaja, M. and Kumar, K. R., 1983, "An Experimental Investigation of Laminar Axisymmetric Submerged Jets," *J. Fluid Mech.*, Vol. 133, pp. 217~231.
- (15) Crowe, T., 1982, "Review - Numerical Models for Dilute Gas-Particle Flows," *J. Fluids Eng.*, Vol. 104, pp. 297~303.
- (16) Friedlander, S. K., 1977, *Smoke Dust and Haze*, Wiley, New York.
- (17) Nazaroff, W. W. and Cass, G. R., 1987, "Particle Deposition from a Natural Convection Flow onto a Vertical Isothermal Flat Plate," *J. Aerosol Sci.*, Vol. 18, pp. 445~455.
- (18) Okuyama, K., Kousaka, Y., Tohge, N. and Yamamoto, S., 1986, "Production of Ultrafine Metal Oxide Aerosol Particles by Thermal Decomposition Metal Alkoxide Vapor," *AIChE J.*, Vol. 32, pp. 2010~2019.
- (19) Patankar, S. V., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corporation, New York.

부 록

모멘트방정식에서 입자응집계수

1. 구형 입자

$$\xi_c = \frac{2k_B T}{3\mu} \left(1 + \exp(\ln^2 \sigma) + 1.257 Kn \exp\left(\frac{1}{2} \ln^2 \sigma\right) (1 + \exp(2 \ln^2 \sigma)) \right)$$

$$\xi_{FM} = b_0 \left(\frac{3k_B T d_p}{\rho_p} \right)^{1/2} \left(\exp\left(\frac{25}{8} \ln^2 \sigma\right) + 2 \exp\left(\frac{5}{8} \ln^2 \sigma\right) + \exp\left(\frac{1}{8} \ln^2 \sigma\right) \right)$$

$$b_0 = 0.633 + 0.092 \sigma^2 - 0.022 \sigma^3$$

$$\xi_c = \frac{2k_B T}{3\mu} \left(1 + \exp(\ln^2 \sigma) \right)$$

$$\begin{aligned}
& + 1.257Kn \exp\left(-\frac{1}{2}\ln^2\sigma\right) (1 \\
& + \exp(-2\ln^2\sigma)) \\
\zeta_{FM} & = b_2 \left(\frac{3k_B T d_p}{\rho_p}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{3}{2}\ln^2\sigma\right) \left(\exp\left(\frac{25}{8}\ln^2\sigma\right) \right. \\
& \quad \left. + 2 \exp\left(\frac{5}{8}\ln^2\sigma\right) + \exp\left(\frac{1}{8}\ln^2\sigma\right)\right) \\
b_2 & = 0.39 + 0.5\sigma - 0.214\sigma^2 + 0.029\sigma^3
\end{aligned}$$

2. agglomerate

$$\begin{aligned}
\zeta_c & = \frac{2k_B T}{3\mu} \left(1 + \exp(\ln^2\sigma) + 1.257Kn \exp\left(\frac{1}{2}\ln^2\sigma\right) \cdot \right. \\
& \quad \left. (1 + \exp(2\ln^2\sigma))\right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\zeta_{FM} & = b_0 \left(\frac{3}{4\pi} v_g\right)^{2/D_f - 1/2} \left(\frac{6k_B T}{\rho_p}\right)^{1/2} r_0^{2-6/D_f} \cdot \\
& \quad \left(\exp\left(2 + \frac{D_f^2}{8}\ln^2\sigma\right) + 2 \exp\left(\frac{1}{2} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \frac{(D_f-2)^2}{8}\ln^2\sigma\right) + \exp\left(\frac{(D_f-4)^2}{8}\ln^2\sigma\right)\right) \\
\zeta_c & = \frac{2k_B T}{3\mu} \left(1 + \exp(\ln^2\sigma) \right. \\
& \quad \left. + 1.257Kn \exp\left(\frac{5-2D_f}{2}\ln^2\sigma\right) (1 \right. \\
& \quad \left. + \exp(-2\ln^2\sigma))\right) \\
\zeta_{FM} & = \frac{b_2}{b_0} \exp\left(\frac{D_f(4-D_f)}{2}\ln^2\sigma\right) \zeta_{FM}
\end{aligned}$$