

중력 침강에 의한 입자 응집의 해석적 연구

Analysis of Gravitational Coagulation of Aerosol Particles

진 형 아 · 정 창 훈 · 이 규 원

광주과학기술원 환경공학과

(1998년 2월 25일 접수, 1998년 8월 31일 채택)

Hyung-Ah Jin, Chang-Hun Jung and Kyoo-Won Lee

Department of Environmental Science and Engineering,

Kwangju Institute of Science and Technology

(Received 25 February 1998; accepted 31 August 1998)

Abstract

To obtain the solution to the time-dependent particle size distribution of an aerosol undergoing gravitational coagulation, the moment method was used which converts the non linear integro-differential equation to a set of ordinary differential equations. A semi-numerical solution was obtained using this method. Subsequently, an analytic solution was given by approximating the collision kernel into a form suitable for the analysis. The results show that during gravitational coagulation, the geometric standard deviation increases and the geometric mean radius decreases as time increases.

key words : aerosol, gravitational coagulation, moment method, coagulation kernel

1. 서 론

분진의 물리적, 화학적 특성은 주로 입자의 크기 분포와 밀접한 관련이 있다. 따라서 시간에 따른 입자의 크기분포의 변화를 아는 것은 중요한 문제인데, 많은 경우 이 문제는 입자간의 상호작용을 고려하지 않고도 해결할 수 있다. 그러나 이러한 입자간의 상호작용을 무시할 수 없는 경우가 있는데 바로 고농도의 입자들이 어떤 기작에 의해 서로 충돌하여 합쳐지는 것으로 이를 응집(coagulation)이라 한다.

입자의 응집은 각종 기계공정 및 환경분야에서 일어나게 되며, 입자가 응집함에 따라 달라지는 입

자의 크기분포변화는 반응공학, 공정제어, 물질전달, 기상학, 대기오염, 원자력 발전소 안전 해석, 유체역학, 분진공학 등 많은 분야에서 응용이 가능한 아주 기본적인 문제이다. 분진제거 등 공해방지 시설의 효율적인 활용과 개발을 위해서는 입자의 모양, 밀도, 크기분포 등 물리적, 화학적 특성 등 여러 가지 요소가 고려되어야 하며, 이는 적절한 방진 시설의 설계 및 적용에 필요하다. 특히 분진의 크기분포와 농도 등은 응집현상과 밀접하게 관련되어 있기 때문에 이를 예측하기 위해서는 응집현상을 일으키는 각종 기작들에 대한 연구가 뒤따라야 한다. 여러 가지 응집 기작 중 가장 많은 이론이 정립되어 있는 브라운 응집에 비해 중력응집에 관한 정량적인 연구는 국내 및 국외 모두 거의 전무한 실정이다.

중력응집을 해석하는 데 있어 기본적인 연구인 중력응집 커널(kernel)에 관한 연구는 Simons *et al.* (1986)에 의해 이루어졌고, Shahub와 Williams (1989)는 달한 반응기에서 입자의 움직임을 계산한 수치모형을 이용하여 해입자의 충돌효율에 관해서 수치적으로 조사하였다. 또한 Lindauer와 Castleman (1970)은 충돌효율을 달리하여 고농도의 분진입자가 존재할 경우 브라운 운동에 대한 중력응집의 중요성에 대해 연구한 바 있다. Cohen과 Vaughan (1971)은 모멘트 방법을 적용하여 입자가 대수 정규분포를 가진다는 가정하에 브라운응집, 중력응집, 난류응집 및 각종 침강 항이 포함된 상태에서의 농도변화, 기하학적 평균 부피 및 기하학적 분산의 변화를 예측하였다. 이후 Reed *et al.* (1980)은 Cohen과 Vaughan (1971)의 결과를 발전시켜 중력응집의 경우 충돌효율을 고려한 상황에서의 모멘트 방법에 의한 입자크기분포를 수치적으로 구하였다. 그러나 오직 중력응집만이 작용했을 때의 시간에 따른 입자크기 분포의 추이에 관한 정량적인 연구 및 해석 해를 구하려는 시도는 거의 없는 실정이다.

이렇듯 지금까지 중력응집에 관한 정량적인 연구가 미약한 주된 이유는 중력응집을 나타내는 식이 아주 복잡하며, 중력응집에서의 응집커널이 충돌효율 등 복잡한 형태의 함수를 갖기 때문이다. 응집과정 중에 입자의 수와 크기가 계속 변하기 때문에 이들 변수들을 예측하는 방정식은 매우 복잡한 비선형 편미적분 방정식으로 표현된다. 이 방정식을 풀 때는 대형 고속 컴퓨터를 이용하여 수치적으로 풀어야 하는데 이런 경우 계산시간이 너무 길어진다.

본 연구에서는 입자의 응집문제를 계산하는데 있어 복잡한 비선형 편미적분 응집 방정식을 1차 선형 연립 미분방정식으로 치환하여 계산시간을 극소화시킨 모멘트 기법(moment method)을 이용, 중력응집이 일어나는 동안 총 입자수, 표준편차, 기하학적 평균입자 반경 등 각 parameter의 시간에 따른 변화를 준수치적으로 계산, 입자의 크기분포변화를 예측하여 이제까지 없었던 중력응집에 대한 정량적인 연구를 하고자 한다. 또한 같은 기법을 이용한 해석해를 구하고 그 과정에서 사용된 근사로 인해 생긴 오차를 보정하기 위해 해석해의 결과가 준(準) 수치해 결과와 일치하도록 보정계수를 구하였다.

다. 실제 물리적 상황에서는 중력에 의해 입자가 응집되는 동시에 침강이 발생하겠으나, 본 연구에서 구하려는 모델은 대기에서 주어진 계(界)에서 입자들이 중력침강이 생기면서 즉시 혼합되는 모델(well-mixed model 혹은 stirred settling coagulation model)로 순수한 중력응집만의 기작을 고려하여 입자 분포나 농도가 어떻게 변화하여 가는지 그 경향을 밝히는 것을 목적으로 하므로, 손실항 및 입자 생성항(source term)은 생략하였다. 이러한 예는 브라운 운동에 의한 응집 모델의 경우 주어진 계의 경계면에서 확산에 의한 손실이 있음에도 불구하고 큰 용기 혹은 계를 모델로 잡았을 때 손실 및 제거 항은 고려하지 않는 것과 같은 이치이다.

2. 이론

2.1 중력응집

응집이란 고농도의 입자들이 어떤 기작에 의하여 서로 충돌·부착되어 보다 커다란 입자를 형성하는 과정이다. 공기 중에 부유하는 크기가 다른 입자계(界) 혹은 에어로졸(aerosol) 시스템 내에서 입자들 간에 상대적인 운동이 있을 때 입자들은 서로 충돌·응집하게 된다. 응집은 브라운 운동에 의한 입자간의 연쇄충돌에 의해 진행되기도 하고 난류나 전기력, 중력 같은 외력에 의해서 일어나기도 한다.

중력 응집은 서로 다른 크기의 입자들이 침강할 때 빠른 속도로 침강하는 큰 입자가 비교적 작은 입자들과 충돌하여 일어난다. 중력장 하에서 크기가 다른 입자들은 중력에 의해 서로 다른 침강 속도로 낙하하게 된다. 이 때 크기가 큰 입자들은 작은 입자들에 비해 빠른 속도로 떨어지게 되며 이 결과 작은 입자들과 충돌이 일어나면서 응집하게 된다. 큰 입자가 낙하하면 그 낙하선상에 있는 공기유체는 큰 입자 때문에 옆으로 밀려나게 되는데, 이 때 작은 입자들이 가지는 관성 때문에 미처 공기유체를 따라가지 못한 입자들이 낙하하는 큰 입자와 충돌·응집하게 된다(그림 1).

2.2 지배방정식

입자의 응집문제에 관한 분석해들 중 가장 간단한 모형중의 하나는 Smoluchowski (1917)가 제안한 것으로 모든 입자들이 동일한 크기를 가졌다는 가

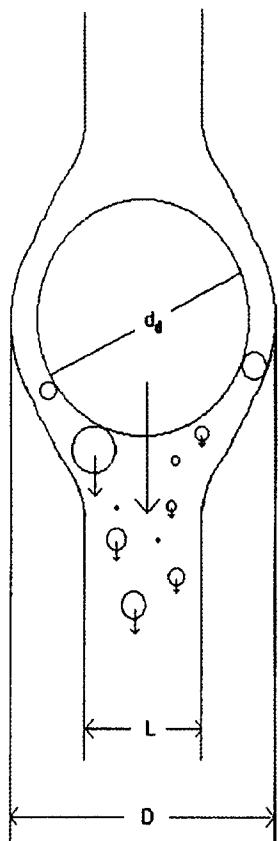


Fig. 1. Schematic diagram of coagulation with small particles when large particle falls by gravitational force.

정 하에 계산된 것이다. 이후 다분산(polydisperse) 입자의 응집현상을 완전하게 표현하는식을 Müller (1928)가 제안했는데 다음과 같은 비선형 편미적 분방정식으로 나타내어진다.

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^x \beta(x - \bar{x}, \bar{x}) n(x - \bar{x}, t) \cdot n(\bar{x}, t) d\bar{x} - n(x, t) \int_0^\infty \beta(x, \bar{x}) n(\bar{x}, t) d\bar{x} \quad (1)$$

부피 x 와 \bar{x} 는 입자의 체적, $n(x, t)$ 는 시간 t 에서의 x 의 체적을 갖는 입자 농도, $\beta(x, \bar{x})$ 는 체적 x 와 \bar{x} 인 두 입자의 응집커널이다. 식 (1)의 우변 첫째 항은 체적 $x - \bar{x}$ 와 \bar{x} 인 입자가 충돌, 체적 x 인 입자가 생성되는 항이고, 둘째 항은 체적 x 인 입자가 모든 크

기의 입자들과 충돌·응집함에 따라 입자가 소멸되는 항이다.

2.3 충돌효율과 응집커널

응집을 정량적으로 해석하기 위해서 입자들간의 충돌 효율(collision efficiency), 응집 커널(coagulation kernel)을 고려해야 하는데 이들은 부딪치는 두 입자의 크기의 함수이고 또 충돌시마다 충돌하는 두 입자가 응집하여 입자의 크기 분포를 변화시키기 때문이다.

충돌효율은 응집커널에 포함되는 항으로 중력 응집율에 직접적인 영향을 주는 요소이다. 작은 입자가 낙하할 때 큰 입자의 반경범위(sweep out area)에 들어온다고 해서 반드시 두 입자간에 충돌이 일어나는 것은 아니다. 그림 1에서 보는 바와 같이 강하하는 큰 입자의 아래쪽에 있는 직경 D의 원통 안에 있는 작은 입자들이 모두 포집되는 것이 아니라 직경 L의 원통 안에 있는 입자들만 포집되게 된다. 단, 여기서 L과 D는 작은 입자의 크기에 따라 달라질 수 있다. 큰 입자의 반경범위(sweep out area)를 충돌하는 두 입자 반경의 합을 반경으로 하는 원의 면적으로 정의한다면, 충돌효율 ϵ 는 큰 입자의 반경범위 중에서 큰 입자와 충돌하는 작은 입자가 차지하는 면적으로 정의할 수 있다. 작은 입자가 규칙하게 섞여있는 곳에 비교적 큰 속도로 침강하는 큰 입자 주변을 흐르는 점성유체에 대하여 Fuchs(1964)는 두 입자의 크기비 r_1/r_2 가 아주 작은 경우에 유효한 충돌효율에 관한식을 만들어냈다. 본 연구에서는 충돌효율을 Fuchs(1964)의 연구에 기초한 다음과 같은 입자 크기의 함수로 가정하여 중력응집을 계산하고자 한다.

$$\epsilon(r_1, r_2) = \frac{3}{2} \left(\frac{r_1}{r_1 + r_2} \right)^2 \quad \text{for } r_1 < r_2 \quad (2)$$

r_1 과 r_2 는 충돌하는 입자의 반경이다.

응집 커널이란 응집하는 두 입자의 충돌 가능성 또는 충돌 횟수로 다음과 같이 표현된다.

$$\beta(r_1, r_2) = \epsilon \pi (r_1 + r_2)^2 |u_s(r_1) - u_s(r_2)| \quad (3)$$

여기서 u_s 는 입자의 종말침강속도(terminal settling velocity)로 다음과 같은 입자크기의 함수로 표현할 수 있다.

$$\beta(r_1, r_2) = \varepsilon \cdot K_G (r_1+r_2)^3 |r_1-r_2| \quad (4)$$

본 연구에서는 상대적으로 입자의 크기가 큰 상태에서 중요한 응집기작인 중력응집을 고려의 대상으로 하므로 입자의 slip은 고려하지 않았다. 여기서 $K_G = 2\pi g\rho / 9\mu$ 이고, g 는 중력상수, ρ 는 입자의 밀도, μ 는 가스의 점성이다.

3. 모멘트 기법을 이용한 준(準) 수치해

3.1 모멘트 기법

비선형 미적분 방정식인 식 (1)을 다음의 변환을 사용하여 k 개의 상미분 방정식으로 전환할 수 있다.

$$X_k(t) = \int_0^\infty x^k n(x, t) dx \quad (5)$$

여기서 $X_k(t)$ 는 수밀도 분포함수의 파워모멘트(power moment)라 한다. 식 (1)의 양변에 x^k 를 곱하면 다음과 같은 파워모멘트에 관한 식으로 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} \frac{dX_k(t)}{dt} &= \frac{1}{2} \int_0^\infty n(x, t) \beta(x, \bar{x}) \cdot [(x + \bar{x})^k - x^k - \bar{x}^k] dx \\ &\times \int_0^\infty n(\bar{x}, t) d\bar{x} \end{aligned} \quad (6)$$

식 (6)에서 $k = 0, 1, 2$ 인 경우를 고려하면 모멘트 X_0, X_1, X_2 는 각각 중력응집으로 인한 부유 입자수, 부유 입자 체적, 부유 입자 체적 제곱을 나타낸다. 모멘트기법을 이용한 준 수치 해(semi-numerical solution)를 구하는 데 있어 입자분포함수를 다음의 대수정규(lognormal)형태로 가정한다.

$$n(x, t) = \frac{N(t)}{\sqrt{2\pi} u(t)} \exp\left[-\frac{\ln^2(x/v_g(t))}{2u(t)}\right] \frac{1}{x} \quad (7)$$

여기서 $N(t)$ 은 총 입자수 농도, $v_g(t)$ 는 기하학적 평균입자체적, $u(t)$ 는 $9\ln^2 \sigma_g$, σ_g 는 기하학적 표준편차이다. 식 (7)을 모멘트를 정의한 식 (5)에 대입하면 다음과 같은 대수분포와 모멘트의 관계식을 얻을 수 있다.

$$X_k(t) = N(t) [v_g(t)]^k \exp\left[\frac{k^2}{2} u(t)\right] \quad (8)$$

그러므로

$$N(t) = X_0(t) \quad (9)$$

$$v_g(t) = \frac{X_1(t)^2}{[X_0(t)^3 X_2(t)]^{1/2}} \quad (10)$$

$$u(t) = \ln\left[\frac{X_0(t) X_2(t)}{X_1(t)^2}\right] \quad (11)$$

이다. 즉 모멘트 기법을 이용하면 중력응집을 나타내는 식 (1)을 식 (9), (10)과 식 (11)의 3개의 연립 1차 선형 미분방정식으로 변환할 수 있다. 변형된 선형식은 수치적으로 계산하여 각 모멘트를 구할 수 있다. 이렇게 구해진 수치 해는 Müller(1928)의 식 (1)을 수치 적분한 직접적 수치 해와 달리 입자가 대수 정규분포를 유지한다는 가정 하에서 구한 각 모멘트를 수치적인 방법으로 구한 것을 의미하므로 본 연구에서는 준 수치해(semi-numerical solution)라 정의하였다. 모멘트를 하나의 식으로 나타내기 위하여 $J_G(j)$ 라는 함수를 사용한다(Reed et al., 1980).

$$J_G(j) = \frac{3}{2} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \int_0^\infty x^j n(x, t) dx \int_0^x \bar{x}^{(j+2/3)} n(x, t) d\bar{x} \quad (12)$$

여기서 r_x 와 $r_{\bar{x}}$ 는 체적이 각각 x 와 \bar{x} 인 입자의 반경이고 함수 F 는 다음의 관계를 만족한다.

$$F(m) = m + a \quad (13)$$

a 는 상수이다. 입자크기분포를 식 (7)에 주어진 대수정규분포로 가정하여 식 (12)에 대입하면 $J_G(j)$ 는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} J_G(j) &= \frac{3}{4} \left(\frac{3}{4\pi}\right) N^2 \exp\left[(2j+1)p + \left(j^2 + j + \frac{1}{2}\right)u\right] \\ &\times \left\{ \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \exp\left[\frac{1}{3}(p+ju)\right] \exp\left[-\left(-\frac{u}{18}\right)\right] \right. \\ &\left. \left[1 - \exp\left(\frac{4u}{9}\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{2}{3}\sqrt{u}\right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (14)$$

erfc 는 상보적 오차함수(complementary error function)이고 $p = \ln v_g$ 이다.

3.2 해법

위 3.1절에서 만들어진 $J_G(j)$ 와 모멘트의 관계를

이용, 시간에 따른 모멘트의 변화를 나타내어 보면 다음과 같다.

$$\frac{dX_0}{dt} = -\frac{2}{9} \frac{\pi \rho g}{\mu} J_G(0) \quad (15)$$

$$\frac{dX_1}{dt} = 0 \quad (16)$$

$$\frac{dX_2}{dt} = \frac{4}{9} \frac{\pi \rho g}{\mu} J_G(1) \quad (17)$$

모멘트 기법을 이용한 1차 상미분 연립방정식의 해를 구하는 데 있어 4th-order Runge-Kutta 방법을 사용하였다.

4. 모멘트 기법을 이용한 해석해

중력 응집에 의한 충돌커널 식 (4)를 입자의 체적에 관해서 나타내면 다음과 같다.

$$\beta(x, \bar{x}) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{4/3} K_G \epsilon^*(x, \bar{x}) (x^{1/3} + \bar{x}^{1/3})^2 |x^{2/3} - \bar{x}^{2/3}| \quad (18)$$

여기서 $\epsilon^*(x, \bar{x})$ 는 다음과 같이 표현된다.

$$\begin{aligned} \epsilon^*(x, \bar{x}) &= \frac{3}{2} \frac{y_c^2}{(x^{1/3} + \bar{x}^{1/3})^2} \\ \text{if } x \leq \bar{x}, \quad y_c &= x^{1/3} \\ \text{if } x > \bar{x}, \quad y_c &= \bar{x}^{1/3} \end{aligned} \quad (19)$$

식 (18)에서 절대값 항인 $|x^{2/3} - \bar{x}^{2/3}|$ 항과 이를 포함한 충돌효율 항은 모멘트 식으로 바꾸기에 적당하지 않다. Cohen과 Vaughan (1971), Reed *et al.* (1980)은 이런 이유로, 식 (14)와 같이 오차함수(error function)가 포함된 모멘트 형식을 유도해 내었다. 그러나, 이러한 오차함수가 포함된 모멘트 형식으로는 해석적인 해를 구할 수 없으므로, 본 연구에서는 응집 커널을 변환시켜 해석적인 해를 구하였다. 먼저, 절대값 항을

$$|x^{2/3} - \bar{x}^{2/3}| \cong b_1 (x^{1/3} - \bar{x}^{1/3})^2 \quad (20)$$

으로, 충돌효율항을

$$\frac{3y_c^2}{2(x^{1/3} + \bar{x}^{1/3})^2} \cong b_2 \frac{3x^{1/3} \bar{x}^{1/3}}{2(x^{1/3} + \bar{x}^{1/3})^2} \quad (21)$$

으로 근사하였다. 여기서 b_1, b_2 는 근사에 따른 보정 계수항이다. $x = \bar{x}$ 인 경우 식 (20)은 0으로 근사한다. $x \gg \bar{x}$ 인 경우 식 (20)은

$$|x^{2/3} - \bar{x}^{2/3}| \cong b_1 (x^{1/3} - \bar{x}^{1/3})^2 \cong x^{2/3}, b_1 = 1 \quad (22)$$

식 (21)의 좌항과 우항은 각각

$$\begin{aligned} \frac{3y_c^{2/3}}{2(x^{1/3} + \bar{x}^{1/3})^2} &\cong \frac{3\bar{x}^{2/3}}{2x^{2/3}} \cong 0 \\ b_2 \frac{3x^{1/3} \bar{x}^{1/3}}{2(x^{1/3} + \bar{x}^{1/3})^2} &\cong b_2 \frac{3\bar{x}^{1/3}}{2x^{2/3}} \cong 0 \end{aligned} \quad (23)$$

으로 각 수렴하는 속도에는 차이가 있으나 양극단의 경계에서 같은 값을 갖게됨을 알 수 있다. 따라서, 중력응집에 의한 충돌커널 식 (18)은 다음과 같이 근사될 수 있다.

$$\beta(x, \bar{x}) = \frac{3}{2} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{4/3} b K_G [(x^{1/3} \bar{x}^{1/3}) (x^{2/3} - \bar{x}^{2/3})^2] \quad (24)$$

여기서 $b = b_1 \times b_2$ 이다. 그럼 2는 중력 응집에 의한 충돌 커널을, 반경이 1 μm 입자와 충돌하는 다른 크기의 입자함수로 나타낸 것으로 식 (24)의 근사된 형태와 식 (18)의 정확한 형태를 비교한 것이다. b 값은 결론적으로 입자가 얼마나 넓게 분포되어 있는가 하는 문제와 직결되므로 초기 기하학적 표준편차 σ_{s0} 의 함수로 표현할 수 있다. 따라서 본 연구에서는 b 를 σ_{s0} 의 변수로 놓고 각 기하학적 표준편차에 해당하는 b 값을 식 (15)~(17)을 수치적으로 계산한 결과와 비교하여 구했다. 이렇게 구한 b 값은 본 연구에 비교된 몇몇 초기 기하학적 표준편차 σ_{s0} 에 대해 표 1과 같다.

그림 2에서 b 값이 큰 경우, 식 (18)의 실제 $\beta(x, \bar{x})$ 와 식 (24)로 근사한 $\beta(x, \bar{x})$ 값의 차이, 즉, 오차는 두 입자의 차이가 작은 경우에 작아짐을 알 수 있다. b

Table 1. Correction value b as a function of initial geometric standard deviation.

Initial geometric standard deviation (σ_{s0})	1.2	1.5	2.0
b value	5.2789	0.9750	0.3378

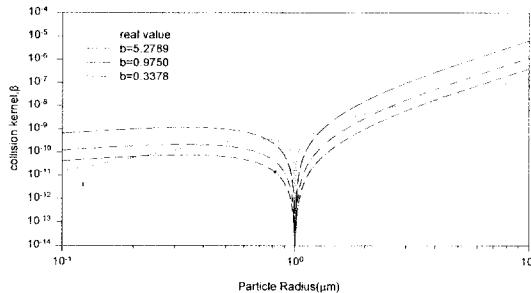


Fig. 2. Comparison of gravitational coagulation kernels used in this study with real value.

값이 작은 경우, 오차는 두 입자의 차이가 클수록 작아지게 된다. 이는 초기 입자의 분포, 즉 초기 기하학적 표준편차가 클수록 b 값이 작아지는 표 1의 결과와 일치하고 있다.

식 (24)를 식 (6)에 의해 모멘트 형식으로 나타내면, $k = 0, 1, 2$ 에 관하여 다음과 같은 식을 구할 수 있다.

$$\frac{dX_0}{dt} = -\frac{3b^*K_G}{2}(X_1X_{1/3}-X_{2/3}^2) \quad (25)$$

$$\frac{dX_1}{dt} = 0 \quad (26)$$

$$\frac{dX_2}{dt} = 3b^* K_G(X_2 X_{4/3}-X_{5/3}^2) \quad (27)$$

여기서 $b^* = (3/4\pi)^{4/3}b$ 이다.

대수정규 함수의 특성에 따라 모멘트들 사이에 다음의 관계식이 성립한다.

$$X_k = X_1 v_g^{k-1} \exp\left[\frac{9}{2}(k^2-1)z\right] \quad (28)$$

여기서 z 는 $\ln^2 \sigma_g$ 으로 정의한다. 식 (28)에 의해 식 (25), (27)은 다음과 같은 형식으로 변환된다.

$$\frac{dX_0}{dt} = -\frac{3b^*K_G}{2} X_1^2 v_g^{-2/3} (e^{-4z}-e^{-5z}) \quad (29)$$

$$\frac{dX_2}{dt} = 3b^* K_G X_1^2 v_g^{4/3} (e^{17z}-e^{16z}) \quad (30)$$

식 (28)을 시간에 대해 미분하면, $k = 0, 2$ 인 경우

에 대해 각각 다음과 같은 식을 유도할 수 있다.

$$\frac{dX_0}{dt} = -v_g^{-1} \exp\left(-\frac{9}{2}z\right) \cdot \left(d \ln v_g + \frac{9}{2}dz\right) X_1/dt \quad (31)$$

$$\frac{dX_2}{dt} = v_g \exp\left(\frac{27}{2}z\right) \cdot \left(d \ln v_g + \frac{27}{2}dz\right) X_1/dt \quad (32)$$

식 (29)~(32)로부터

$$d \ln v_g = \frac{9(3e^{-3z}-2)}{2(2-e^{-3z})} dz \quad (33)$$

식 (33)을 적분하면

$$\frac{v_g}{v_{g0}} = \left(\frac{2-e^{-3z}}{2-e^{-3z0}}\right)^3 \exp\left[\frac{9}{2}(z_0-z)\right] \quad (34)$$

여기서 z_0 과 v_{g0} 는 z 와 v_g 의 초기 값이다. 식 (33)과 식 (34)를 식 (31)과 식 (32)에 넣고 식 (29)을 이용하면

$$\frac{6(2-e^{-3z0})e^{-3z}dz}{v_g^{4/3} e^{6z0} (2-e^{-3z})^2 (e^{-z}-e^{-2z})} = b^* K_G N_0 dt \quad (35)$$

여기서 N_0 는 N 의 초기 값이다. 식 (35)에서 해석적인 해를 구하기 위하여 다음과 같이 지정할 수 있다.

$$\frac{e^{-3z}}{e^{-z}-e^{-2z}} \cong \frac{e^{-3z0}}{e^{-z0}-e^{-2z0}} \quad (36)$$

이런 근사후 식 (35)을 적분하면,

$$z (= \ln^2 \sigma_g) = \frac{1}{3} \ln \frac{At' - 1}{2At' - e^{-3z0}} \quad (37)$$

를 구할 수 있다.

여기서 $t' = K_G N_0 v_g^{4/3} t$ 로 무차원화 된 시간이고,

$$A = \frac{e^{6z0}(e^{-z0}-e^{-2z0})}{2} b^* \text{과 같이 정의한다. 식 (37)에서 기하학적 표준편차 } (\sigma_g) \text{를 구할 수 있다.}$$

식 (28)에서 N/N_0 의 관계식을 구한 후 식 (37)을 식 (34)에 대입하면 시간에 따른 총 입자수의 변화율은

$$\frac{N}{N_0} = \frac{X_1 v_g^{-1} e^{-9z/2}}{X_1 v_g^{-1} e^{-9z0/2}} = (1 - At')^3 \quad (38)$$

과 같이 나타낼 수 있다. 이렇게 구한 식 (34), (37), (38)을 대수 정규분포를 나타내는 식 (7)에 대입하면 시간에 따른 입자의 크기 분포를 구할 수 있다.

5. 결과 및 고찰

그림 3, 4, 5, 6은 각각 총 입자수 N , 기하학적 표준편차 σ_g , 기하학적 입자반경 $r_g = \left(\frac{3V_g}{4\pi} \right)^{1/3}$, 부유하는 총 입자 체적의 50%를 차지하는 입자반경 r_{50} 의 무차원적 시간에 따른 변화로 초기 기하학적 표준편차 σ_{g0} 가 1.2, 1.5인 경우에 대해 각각 수치해와 해석해를 비교하였다. 브라운 운동에 의한 입자 응집의 경우, 시간이 증가함에 따라 표준편차가 일정한 값으로 수렴하며, 기하학적 평균 반경의 변화는 시간에 따라 증가하는 것이 여러 연구를 통해 밝혀진 바 있다(Lee, 1983). 이에 비해 중력에 의한 입자 응집의 경우, 표준편차는 시간에 따라 증가하고 기하학적 평균 반경은 감소하는 것으로 나타났다. r_{50} 과 r_g , σ_g 는 다음의 관계를 만족한다.

$$r_{50} = r_g [3 \exp(\ln^2 \sigma_g)] \quad (39)$$

그림 6에서 r_{50}/r_{50_0} 는 시간에 따라 증가하고 있음을 알 수 있다. 여기서 r_{50_0} 는 r_{50} 의 초기값이다. 브라운 응집의 경우, 표준 편차가 시간에 지남에 따라 일정한 값으로 수렴하고, r_g 가 증가하여 r_{50} 가 증가하게 된다. 그러나 중력응집의 경우, r_g 는 시간에 따라 감소하나 σ_g 가 더 급격히 증가함으로 r_{50} 가 증가하게 됨을 알 수 있다.

기존의 연구에서 난류에 의한 응집이 일어나는 동안 입자 크기 분포의 변화를 보면 기하학적 평균 반경이 시간에 따라 점차 감소하고 있다(Yoshida *et al.*, 1979). 이렇듯 난류 응집과 중력 응집의 경우 기하학적 표준편차가 시간에 따라 감소하는 것은 응집커널을 통해 이해할 수 있다. 난류에 의한 응집과 중력에 의한 응집은 입자 크기가 클수록 응집커널이 증가하는 경향을 보이며 이는 브라운 응집과는 아주 다른 경향을 보여주고 있다(Hidy and Brock, 1970). 그림 5에서 초기 기하학적 표준편차가 1.2인 경우, 기하학적 평균 반경이 다소 증가하다 감소하기 시작하는 것은 초기 분포가 좁은 경우, 상대적으로 입자가 큰 쪽과 응집이 일어나지 않으므로 주위

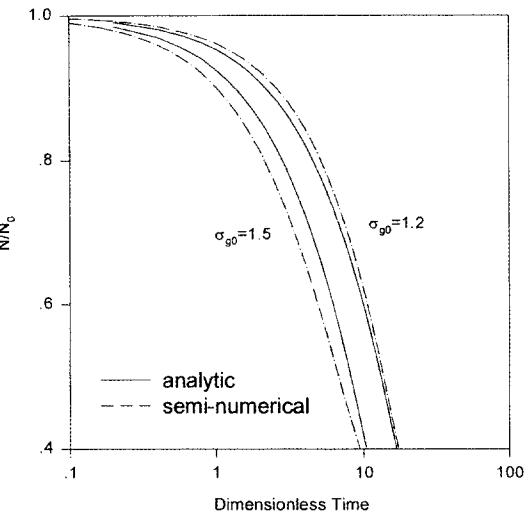


Fig. 3. Comparison of total number concentrations, N/N_0 as obtained by semi-numerical and by analytic solutions.

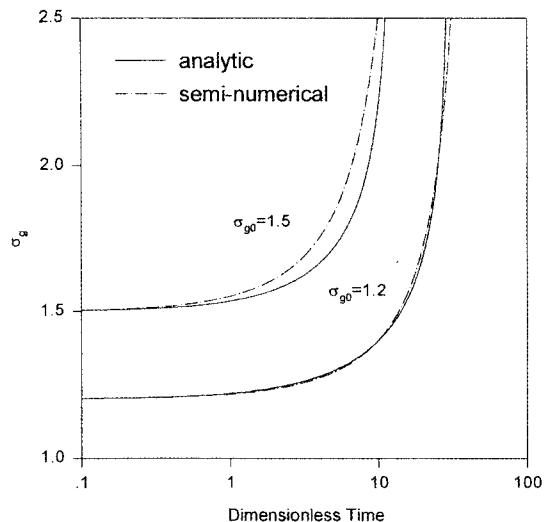


Fig. 4. Comparison of change of geometric standard deviations, σ_g , as obtained by semi-numerical and by analytic solutions.

의 입자들과 응집을 하여 기하학적 평균 반경이 증가하다 시간이 지나 기하학적 표준편차가 커진 후에 본래 경향대로 감소하는 것으로 해석할 수 있다. 여러 응집 메카니즘과 비교하면 알 수 있듯이 중력

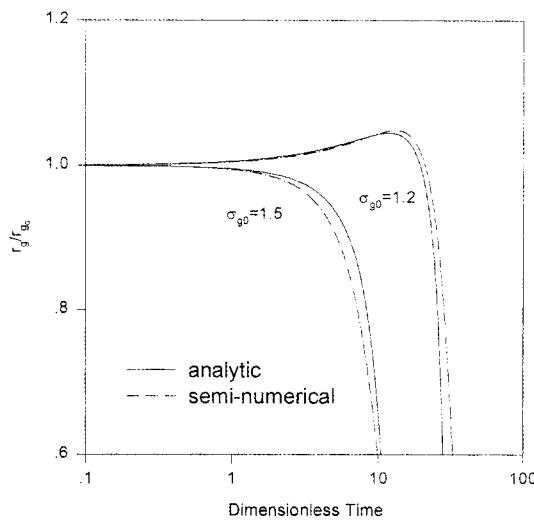


Fig. 5. Comparison of change of geometric mean radius, r_g/r_{g0} as obtained by semi-numerical and by analytic solutions.

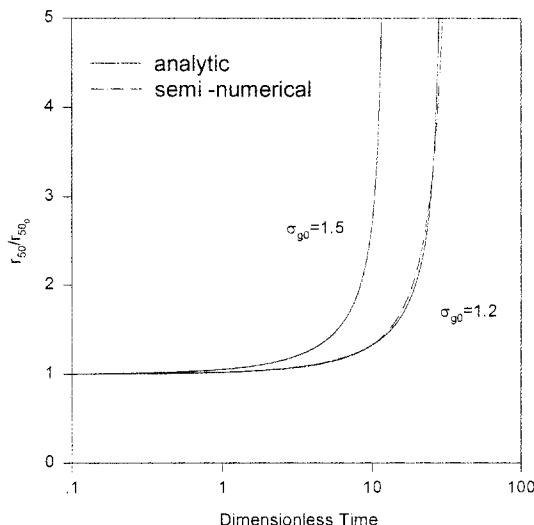


Fig. 6. Comparison of the 50 percent radius size, r_{50}/r_{500} as obtained by semi-numerical and by analytic solutions.

침강의 경우, 일정한 크기의 입자는 그 입자의 크기보다 큰 입자가 작은 입자보다 일반적으로 더 큰 응집효과를 유발시키며, 특히, 입자의 크기가 동일한 경우에 있어서는 응집이 일어나지 않는 특성에 의

한 것으로 해석된다. 또, 중력응집의 경우 본 연구에서 모멘트 방법을 적용하기 위해 입자분포가 대수 정규분포를 갖는다고 가정하였으나, 실제 중력응집이 대수 정규분포를 갖지 않음으로 해서 표준편차와 기하학적 입자 반경이 급속히 증가, 감소하는 것으로 해석할 수 있다. 그럼 4, 5에서 볼 수 있듯이 기하학적 표준편차는 일정시간이 지나면 급속도로 증가하고, 기하학적 평균반경은 일정시간후에 급속도로 감소한다. 이러한 경향은 중력응집의 경우, 초기 입자 분포를 대수 정규 분포로 하더라도 일정시간이 지난 후엔 입자의 크기 분포를 대수 정규분포로 나타내기 어렵다는 것을 말해준다. 기하학적 표준편차가 급속히 증가하고, 기하학적 평균반경이 급속히 감소하는 시간에서 준 수치적 방법은 수치적 불안정(numerical instability)으로 계산을 멈추게 된다. 또한,식 (37), (38)에서 알 수 있듯이 해석적인 식 역시 시간을 무한대로 주게 되면 어떤 일정한 값으로 수렴하지 않고 발산하는 것을 볼 수 있다. 또, 이러한 불안정이 일어나는 시간은 초기 기하학적 표준편차가 작을수록 상대적으로 긴 시간이 흐른 후에, 그리고 초기 기하학적 표준편차가 클수록 짧은 시간에 나타나는 것을 알 수 있다. 결국 본 연구의 결과는 초기조건에 따라 다소의 차이는 있지만 어느 일정시간까지만 유효하고 응집시간이 걸어진 후의 결과는 의미가 없는 것으로 보여진다. 모멘트 방법에 의한 결과는 초기 기하학적 표준편차(σ_{g0})가 1.2인 경우일 때는 무차원적 시간이 약 20 정도, 기하학적 표준편차(σ_{g0})가 1.5일 경우에는 무차원적 시간이 약 10 정도까지 유효하다고 고려된다.

6. 결 론

본 연구에서 최초로 중력침강에 의한 입자응집 문제에 관한 정량적 연구를 하여, 부유하는 총 입자수, 기하학적 표준편차, 기하학적 평균 반경 등 각 parameter의 시간에 따른 변화를 알아보았다.

응집커널항을 표현하기 위해 준 수치해를 구하는데 있어 오차함수가 사용되었고 해석해에서는 응집커널항에 보정계수를 두어 준 수치해와 근사하도록 하였다. 또한 본 연구의 모든 결과는 입자분포가 시간에 관계없이 대수 정규분포를 유지한다는 가정

하에 모멘트 방법을 이용하여 해를 구하였다. 그러나 실제 중력응집이 일어나는 동안 입자 분포가 시간에 관계없이 대수 정규분포를 하고 있는지, 아니면 다른 분포를 가지게 되는지에 대한 연구가 부족한 실정이다. 본 연구의 결과로 초기 대수 정규분포를 가지고 있는 에어로졸이 중력에 의한 응집을 하는 과정에서 시간이 길어짐에 따라 대수 정규분포로 표현하기 어려운 분포를 나타냄을 발견하였다. 이에 대한 정확한 결과를 도출하기 위해서는 실험적 연구 및 직접 수치 해석 방법을 이용하여 중력 침강이 일어나는 동안의 입자크기분포를 알아내어 그 결과를 비교하는 연구가 뒤따라야 한다.

감 사

본 연구는 한국과학재단 핵심연구과제 (KOSEF 971-1107-051)의 일환으로 수행되었으며, 도움을 주신분께 감사드립니다.

참 고 문 헌

- Cohen, E.R. and E.U. Vaughan (1971) Approximate solution of the equations for aerosol agglomeration, *J. Colloid and Interface Sci.*, 35, 612-623.
- Fuchs, N.A. (1964) *The mechanics of aerosols*, Pergamon, New York, 319-324pp.
- Hidy, G.M. and J.R. Brock (1970) *The dynamics of aerocolloidal systems*, Pergamon Press, Great Britain, 325 pp.
- Lee, K.W. (1983) Change of particle size distribution during Brownian coagulation, *J. Colloid and Interface Sci.*, 92, 315-325.
- Lindauer, G.D. and A.W. Castleman (1970) The importance of gravitational coagulation on the settling of high-mass density aerosols, *J. Nucl. Sci. Eng.*, 42, 58-63.
- Müller, H. (1928) Zur allgemeinen theorie der raschen koagulation, *Kolloidchemische Beihefte*, 27, 223-250.
- Reed, L.D., K.W. Lee, and J.A. Gieseke (1980) The behavior of contained radioactive suspensions, *Nucl. Sci. Eng.*, 75, 167-180.
- Shahub, A.M. and M.M.R. Williams (1989) The importance of collision efficiency in the coagulation of nuclear aerosol particles, *Nuclear Technol.* 86, 80-86.
- Simons, S., M.M.R. Williams, and J.S. Cassell (1986) A kernel for combined Brownian and gravitational coagulation, *J. Aerosol Sci.*, 17, 789-793.
- Smoluchowski, M.V. (1917) Versuch einer mathematischen theorie der koagulations kinetik kolloider l sunger, *Z. Phys. Chem.*, 92, 129-168.
- Okuyama, K., Y. Kousaka, Y. Kida, and T. Yoshida (1977) Turbulent coagulation of aerosols in a stirred tank, *J. Chem. Eng. Japan.*, 10, 142-147.