

다공성 물질을 통과하는 관내 유동에서의 미세 입자 응축성장 전산 가시화

문지후* · 김대겸†

Computational visualization for condensational growth of micro-particles in the pipe flow through a porous material

Jihoo Moon* and Daegyoun Kim†

Abstract In this study, we numerically simulate the condensational growth of micron-sized particles traveling through a pipe filled with humidified air. Using the finite volume method and Lagrangian particle tracking technique, the mixture of particle-laden flow with moist air in a T-junction pipe is simulated. The condensational growth of particles is calculated by considering the mass transfer of vapor in the air onto the particle surface. The results indicate that the growth rate of the particles increases as the relative humidity of air is higher. Furthermore, the placement of a porous media with low permeability in the pipe could enhance the degree of condensational growth.

Key Words : Condensational Growth (응축성장), Particle-laden Flow (입자 포함 유동), Porous Material (다공성 물질), Computational Flow Visualization (전산 유동가시화)

1. 서론

입자가 습한 공기를 통과할 때, 주변 수증기가 입자 표면에 응결하며 입자의 크기가 증가하는데, 이를 응축성장이라고 한다. 입자의 크기는 필터에 의한 포집 제거 시의 효율과 직결되며, 대부분의 물리적 필터 방식의 경우 입자의 크기가 클수록 일반적으로 포집 효율은 증가한다⁽¹⁾. 따라서 미세 입자의 포집이 중요한 산업 및 공기정화장치 개발 등의 분야 등에서 증기에 의한 미세 입자의 응축성장 메커니즘은 매우 중요한 연구 주제이다^(2,3).

수증기를 포함하는 공기의 관내 유동 내에서 발생하는 미세 입자의 응축성장은 이론 및 실험을 통해 다년간 연구되었다. 일반적으로 공기 중 수증기가 포화상태를 넘어 과포화상태에 도달하면 입자의 응축성장률이 급격히 증가한다^(4,5). 특히 몇몇 연구에서는 이러한 특성을 이용하여 공기정화장치 내의 수증기를 과포화상태로 유지해 미세 입자의 크기를 성장시켜 관성충돌에 의한 포집 효율을 향상시키고자 하였다. 더 나아가 응축성장을 이용해 HEPA 필터 없이 관성충돌장치⁽¹⁾만으로 미세 입자를 제거할 수 있는 무필터 공기청정기의 개발 또한 시도되었다⁽⁶⁾. 이러한 방법을 통해 기존에 관성충돌 메커니즘으로 제거할 수 없었던 PM2.5 크기 미만의 미세 입자를 약 100배 정도로 증가시켜

† Mechanical Engineering, KAIST, Associate Professor
E-mail: daegyoun@kaist.ac.kr

* Mechanical Engineering, KAIST, Ph.D. Student

효과적으로 제거할 수 있음이 알려진 바 있다.

정지 상태 또는 단순한 유동 내의 입자의 응축성장률은 이론적으로도 쉽게 예측할 수 있다⁽⁷⁾. 하지만 난류 유동이 발생하는 복잡한 관내 유동에서의 응축성장을 분석하기 위해서는 실험 또는 수치해석이 필수적이다. 유동 해석과 동시에 이루어지는 입자의 거동 및 응축성장을 종합적으로 해석하기 위한 수치해석 기법은 다양하게 개발되어 있으며 각 방법은 계산 속도와 정확도 등의 측면에서 장단점이 존재한다. 유한체적법(finite volume method)을 이용한 유동 해석과 더불어 널리 사용되는 방법으로는 라그랑지안 입자 추적법(lagrangian particle tracking)이 대표적이다. 이외에도 입자 크기의 분포를 이산화하고 여러 노드로 나누어 계산하는 노드 기법(nodal method)⁽⁸⁾, 유체를 불연속 편미분 방정식을 구성하는 가상의 입자로 모델링하는 직교 기반 모멘트 방법(quadrature based method of moment) 등이 있다⁽⁹⁾.

다공성 물질은 유체가 흐를 수 있는 공극을 갖고 있는 물질을 말한다. 일정 부피당 공극이 차지하는 부피의 비율인 공극률을 포함하는 공극의 형상에 따라 유체의 투과도가 결정되며, 관내 유동에서 이러한 다공성 매질의 존재는 유체의 흐름을 방해하며, 이러한 효과는 압력 강하로 나타나게 된다. 층류이거나 난류가 강하게 발생하지 않는 관내 유동에서 단위 이동 거리당 다공성 물질에 의해 발생하는 압력 강하량은 물질의 투과도에 반비례하며 유속에 비례하여 증가한다. 이를 달시 법칙(Darcy's law)이라고 한다⁽¹⁰⁾.

이번 연구에서는 수치해석을 통해 에어로졸을 포함하는 공기와 습한 공기의 T자형 관을 통한 유동 혼합 및 그로 인해 발생하는 응축성장 현상에서 공기의 상대습도가 응축성장률에 미치는 영향을 분석하였다. 이에 더해 관내에 다공성 물질이 존재할 경우 물질의 투과성에 따라 응축성장률이 어떻게 달라지는지 확인하고자 하였다. 다공성 물질이 관내에 위치할 경우 유속 분포가 불균일해질 것이고, 이에 따라서 유동에 포함된 미세 입자의 거동 또한 달라져 응축성장률에 영향을 미칠 것으로 예상하였다.

2. 수치해석 셋업

2.1 수치해석 기법

본 연구의 수치해석은 OpenFOAM을 사용해 이루어졌다⁽¹¹⁾. OpenFOAM은 C++로 작성된 유한체적법 기반 유동해석 라이브러리이며, 소스 코드가 공개되는 오픈소스 프로그램이다. 에어로졸 및 수증기를 포함한 공기의 관내 유동을 계산하기 위하여 OpenFOAM의 reactingParcelFoam 코드를 사용하였다. 해당 코드는 PIMPLE 알고리즘을 사용하여 시간에 따른 유동을 계산하며, 각 시간 단계마다 라그랑지안 입자 추적법을 기반으로 유동장에 의한 입자의 위치 변화 및 응축성장을 계산한다. 입자의 크기가 충분히 작아 유동에 영향을 미치지 않을 것으로 가정하여 단방향 연결(One-way coupling) 수치해석을 진행하였으며, 유속 분포 뿐만 아니라 중력 및 공기 저항의 영향을 고려하여 입자의 움직임을 계산하였다.

관내에 위치한 다공성 물질은 달시 법칙(Darcy's law)를 이용하여 모델링되었다. 앞서 언급되었듯 해당 법칙에서 유동의 다공성 물질에 의한 단위 이동 거리당 압력 강하량(∇p)은 유량(q) 및 유동 방향의 물질 두께에 정비례하도록 계산된다.

$$\nabla p = -q \frac{\mu}{k} \quad (1)$$

여기서 k 는 물질의 투과도, μ 는 유체의 동점성계수를 의미한다. 이러한 다공성 물질의 효과는 수치해석 과정에서 모멘텀 방정식의 소스항(source term, S)으로 표현된다.

$$\frac{\partial(\rho U)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu((\nabla U) + (\nabla U)^T)) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot U)I + \rho g + S \quad (2)$$

U 는 3차원 속도 벡터, I 는 3차원 단위 벡터, ρ 는 유체의 밀도를 의미하며, g 는 중력가속도이다. 위 식에서 소스 항은 단위 부피 당 힘의

단위를 갖고 있으며, 3차원 벡터 형태를 갖는다. 각 방향 당 소스 항은 다음과 같이 계산된다.

$$S_i = \frac{F_i}{V} = - \left(C_1 U_i + \frac{1}{2} C_2 \rho |U| U_i \right) \frac{1}{t} \quad (3)$$

위 식에서 F_i 는 다공성 물질이 유체에 i 방향으로 작용하는 힘의 크기를, V 는 유체의 부피를 의미한다. t 는 해당 방향으로의 다공성 물질의 두께를 의미한다. C_1 과 C_2 는 다공성 물질의 투과도에 따라 결정되며, 당시 법칙만 적용할 경우 $C_2 = 0$ 으로 계산된다.

후술 될 공기 유량 및 파이프의 직경에 의하면 관내 유동의 레이놀즈 수는 약 $Re = 2000$ 내외로 층류에서 난류로 전환되는 유속 범위에 속한다. 따라서 정확한 유동 해석을 위하여 $k-\omega$ 모델을 이용해 난류 수치해석을 수행하였다. 시간 단계의 크기는 10^{-3} s로 설정하였으며, 효율적인 계산을 위하여 Courant 수 0.4 미만의 범위 내에서 유동적으로 조절될 수 있다.

2.2. 응축성장 모델

입자의 응축성장률은 입자 표면에 응결되는 수증기의 단위 시간당 질량유속(mass flux)을 통해 계산된다⁽¹²⁾.

$$\frac{dm}{dt} = - \frac{\rho Sh DC_m A}{d} \ln \frac{1 - Y_\infty}{1 - Y_{surf}} \quad (4)$$

ρ 는 유체의 밀도, d 는 입자의 직경, D 는 수증기의 확산율, A 는 입자의 표면적을 의미한다. Y_{surf} 와 Y_∞ 는 각각 표면에서와 주변 유체에서의 수증기의 질량분율을 나타낸다. Sh 는 Sherwood 수로 다음과 같이 계산된다⁽¹³⁾.

$$Sh = \sqrt[3]{1 + Re_d \cdot \frac{\mu}{\rho D}} \cdot \max[1, Re_d^{0.077}] \quad (5)$$

C_m 은 Fuchs-Knudsen 보정계수이다⁽¹⁴⁾.

$$C_m = \frac{1 + Kn}{1 + \left(\frac{4}{3a_m} + 0.377\right)Kn + \frac{4}{3a_m}Kn^2} \quad (6)$$

Kn 은 Knudsen 수로 $Kn = 2\lambda/d$ 로 계산되며, λ 는 수증기의 평균자유거리, α_m 은 열질량수용 계수(mass thermal accommodation coefficient)이다⁽¹⁵⁾. 해당 응축성장 모델의 유효성은 기존 연구를 통해 실험적으로 검증된 바 있다⁽¹⁶⁾. 이번 연구에서 각각의 값은 $\lambda = 68$ nm, $\alpha_m = 1$ 로 설정되었다.

2.3. 해석 도메인 설정

본 연구에서는 직경 2 cm의 원형 단면을 갖는 T자형 파이프의 두 방향에서 각각 습한 공기 및 미세 입자를 포함하는 공기가 유입되는 조건에 대한 3차원 난류 수치해석을 진행하였다(Fig. 1). 공기의 유량, 상대습도 및 T자형 파이프의 물리적 크기 등은 Longest et al.(2010)의 연구를 참고하여 선정하였다⁽¹⁷⁾. 습한 공기의 온도는 25°C, 유량은 333.3 cm³/s이며, 상대습도는 75%, 100%, 105%로 바뀌가며 수치해석을 진행하였다. 미세 입자를 포함하는 유동의 온도는 21°C, 유량은 150 cm³/s, 상대습도는 97.5%로 모든 케이스에 대하여 동일하게 고정되었다. 미세 입자의 초기 직경은 10 μm로 균일하도록 하였으며, 밀도 등 물질 특성은 고체 상태의 NaCl에 해당하는 값을 사용하였다. 또한, 매초 당 $n = 10^5$ 개의 입자가 미세 입자 부분 유동 입구를 통해 유입되도록 하였다.

다공성 물질이 포함된 관내 유동 해석의 경우 온도나 유량 등 다른 조건들은 상대습도에 따른 유동 해석 케이스들과 동일하게 유지한 채 왼쪽에서 유입되는 습한 공기의 상대습도를 100%로 고정하였으며, 파이프와 동일한 직경 ($\phi = 0.02$ m)을 갖는 다공성 물질을 혼합 지점에서 0.1 m부터 0.2 m 지점까지 위치하도록 하였다. 다공성 물질의 투과도 k 를 5×10^{-6} m²부터 5×10^{-10} m²까지 10배씩 감소시켜가며 수치해석을 수행했다.

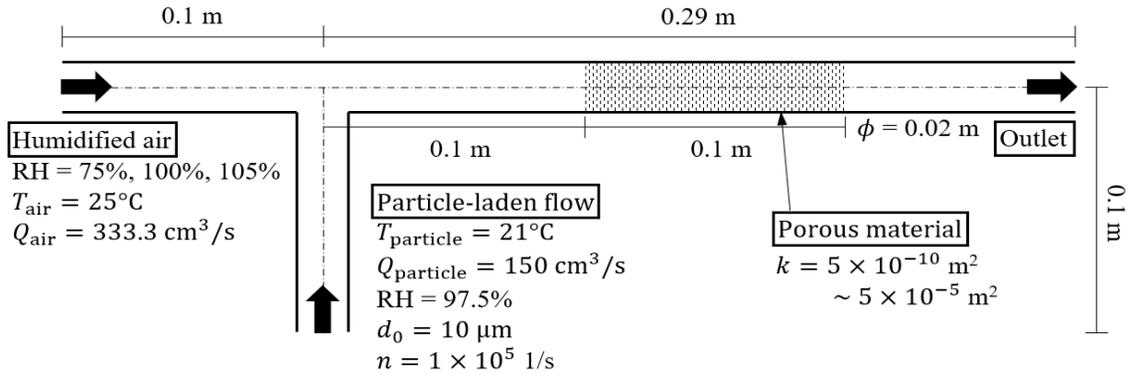


Fig. 1. Simulation domain and input conditions.

해석 도메인은 약 50000개의 셀을 갖는 3차원 비균일 격자로 제작되었으며, 사면체 또는 육면체 형태의 격자가 모두 사용되었다.

앞서 언급된 조건들을 적용하여 1초 동안 파이프를 통과하는 유동 및 입자의 거동을 계산하였다. 이때 모든 케이스에서 내부 유동은 해석 시작 이후 약 0.5초 내외에 정상상태로 발달함을 확인하였다. 내부 유동의 압력 및 속도 분포, 유출구로 나오는 입자의 응축성장률 등을 분석하였다.

3. 결과 및 분석

3.1 상대습도에 따른 미세 입자의 응축성장률 변화

T자 파이프의 서로 다른 채널에서 유입된 습한 공기와 미세 입자를 포함하는 공기가 만나 온도 및 습도 등의 물리량이 혼합되었으며, 그 양상을 Fig. 2(a)에서 확인할 수 있다. 또한 Fig. 2(b)와 같이 혼합 이후에 관을 통과한 뒤 균일한 유동장이 형성됨을 확인하였다.

미세 입자들은 유입구에서 T자 분기점까지 이동하는 동안 미세 입자를 포함하는 유동이 자체적으로 보유하고 있는 습도(RH = 97.5%)에 의해 응축성장을 하였으며, 이 구간에서 응축성장률은 왼쪽에서 유입된 습한 공기와 혼합된 이후 유출구로 진행하는 동안에도 지속적인 미세 입자의 응축성장이 이루어졌다(Fig. 3). 아래에서 유입되는 미세 입자 유동의 초기 조건

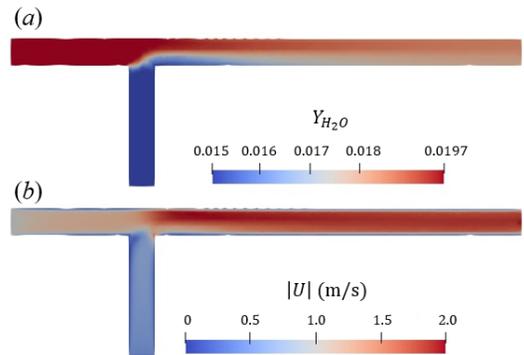


Fig. 2. (a) Mixing of water vapor and (b) velocity magnitude field in the cross section of T-junction pipe (RH = 100%, $t = 1$ s). Y_{H_2O} is the mass fraction of vapor in air.

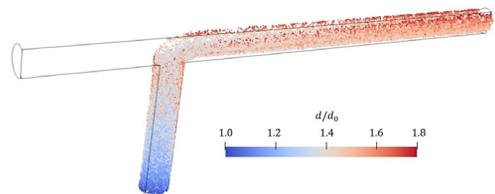


Fig. 3. Particle flowing inside the T-junction pipe. The color represents the growth ratio d/d_0 of each particle (RH = 100%, $t = 1$ s).

은 모든 케이스에서 동일하므로 이 구간을 통과한 뒤의 평균 응축성장률 역시 모든 케이스에 대해 $\bar{d}/d_0 = 1.385$ 로 거의 동일하게 계산되었다. 아래 유입구에서 위쪽으로 도달한 미세

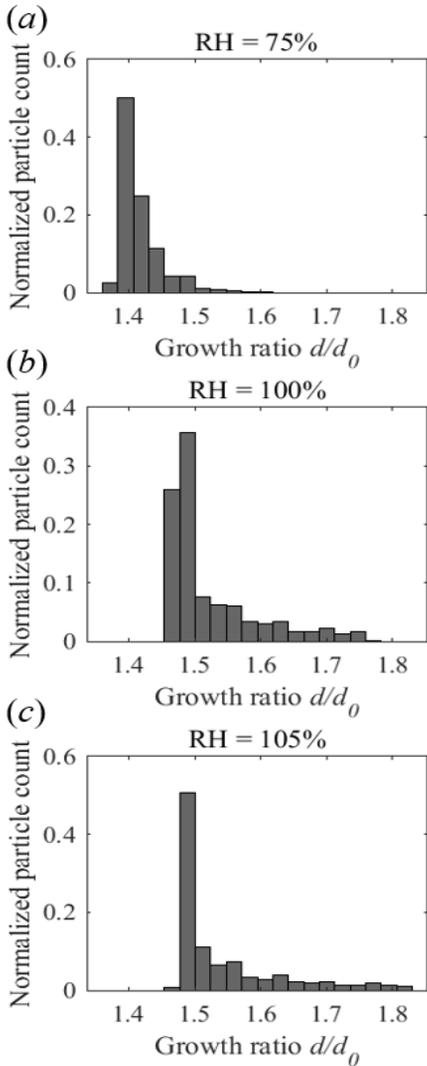


Fig. 4. Particle size distribution for cases with different relative humidity (RH) at the outlet ($t = 1$ s): (a) RH = 75%, (b) RH = 100%, (c) RH = 105%.

입자는 관내 유동 흐름에 의해 모두 유출구가 위치한 오른쪽으로 이동하였다.

상대습도가 75%, 100%, 105%로 증가함에 따라 미세 입자의 성장률 d/d_0 의 평균값은 각각 1.42, 1.52, 1.54로 점진적으로 증가하였다. 이렇듯 상대습도가 높을수록 입자의 응축성장이 더 활발히 이루어지는 경향은 기존 연구들을 통해 이미 밝혀진 바 있다^(4,5). 각 케이스 별 입자 크기 분포의 차이를 확인하기 위하여 유동 혼합

이후 0.25 m만큼 진행한 지점에서부터 유출구까지의 공간 전체에 대하여 $t = 1$ s에서의 입자의 성장률을 히스토그램으로 나타내었다 (Fig. 4). 그 결과 분포 형태에서의 눈에 띄는 차이는 관찰되지 않았으며, 측정 범위 내에서 가장 작은 크기 범위에 속하는 입자들의 수가 가장 많이 측정되었다. 습도가 증가함에 따라서 입자 크기의 최솟값, 평균값 및 최댓값 모두 증가함을 확인하였다.

3.2. 다공성 물질의 투과도에 따른 미세 입자의 응축성장률 변화

다공성 물질의 투과도 k 가 감소할수록 유동의 흐름을 더 많이 방해하게 된다. 본 연구에서 진행한 수치해석의 경우 유입구의 유량 Q_{air} 와 $Q_{particle}$ 을 고정하였기 때문에 관내 평균 유속은 투과도에 관계 없이 모든 케이스에서 동일하였다. 하지만 투과도가 감소함에 따라 유입구와 유출구의 압력 차이가 점차 증가하였다. 습한 공기가 들어오는 왼쪽의 유입구와 유출구의 압력 차 Δp 의 경우 다공성 물질이 없을 때에는 $\Delta p = 3$ Pa였지만, 다공성 물질의 투과도가 가장 높은 케이스인 $k = 5 \times 10^{-6} \text{ m}^2$ 의 경우 $\Delta p = 5$ Pa, 가장 낮은 $k = 5 \times 10^{-10} \text{ m}^2$ 케이스에서는 $\Delta p = 3726$ Pa로 계산되었다. 혼합부 이후 관내 유속 분포 또한 기존의 균일한 포물선 형태의 분포에서 불균일하게 변했다 (Fig. 5).

투과도가 감소할수록 미세 입자의 평균 크기는 증가하는 경향을 보였다 (Fig. 6). 해당 결과를 해석하기 위하여 Fig. 5의 두 케이스에서 유출구로부터 4 cm 구간에 해당하는 구간의 입자의 속도를 더 면밀하게 조사하였다. $k = 5 \times 10^{-6} \text{ m}^2$ 케이스와 $k = 5 \times 10^{-10} \text{ m}^2$ 케이스에서 방사 방향 속도(radial velocity)의 평균 크기는 각각 0.03 m/s와 0.09 m/s로, 투과도가 더 낮은 케이스에서 약 3배 더 크게 계산되었다. 또한 구간 내 입자 속력의 표준편차는 각각 0.57 m/s, 0.09 m/s로 투과도가 더 낮은 케이스의 속도 크기가 훨씬 균질한 것으로 나타났다. 이에 더해, Fig. 6에서 평균 응축성장률(\bar{d}/d_0)과 관내 체류 시간

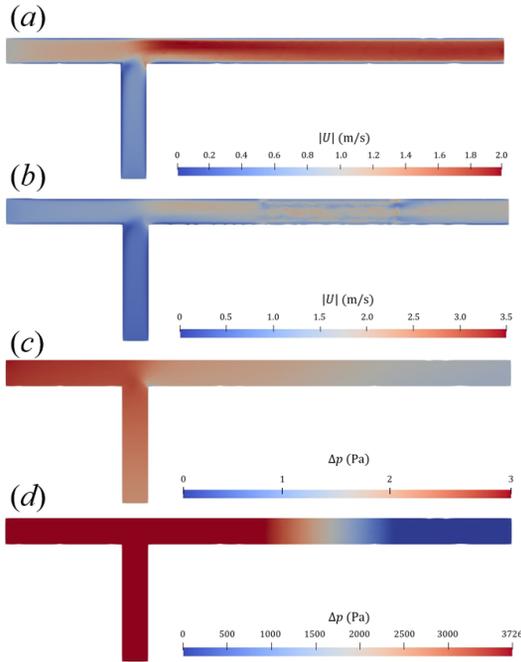


Fig. 5. Velocity magnitude and pressure distribution for (a, c) $k = 5 \times 10^{-6} \text{ m}^2$ and for (b, d) $k = 5 \times 10^{-10} \text{ m}^2$.

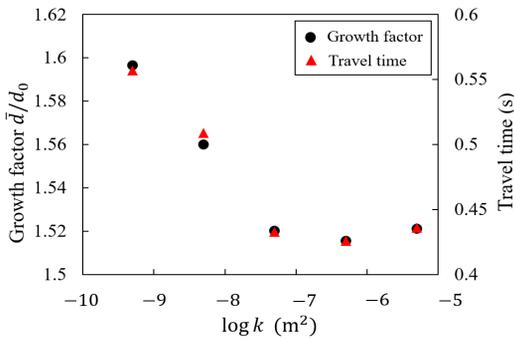


Fig. 6. Change in averaged growth factor (\bar{d}/d_0 , black dots) and travel time (red triangles) with respect to the permeability of the porous material.

(travel time)의 변화 양상이 거의 일치하는 것을 확인할 수 있다. 종합해보면, 투과도 감소에 따른 응축성장률의 증가는 불균일한 유동에 의해 미세 입자의 거동이 불규칙해지고, 이에 의해 입자의 관내 체류 시간이 증가해 더 오랜 시간 동안 응축성장을 하기 때문임을 알 수 있다.

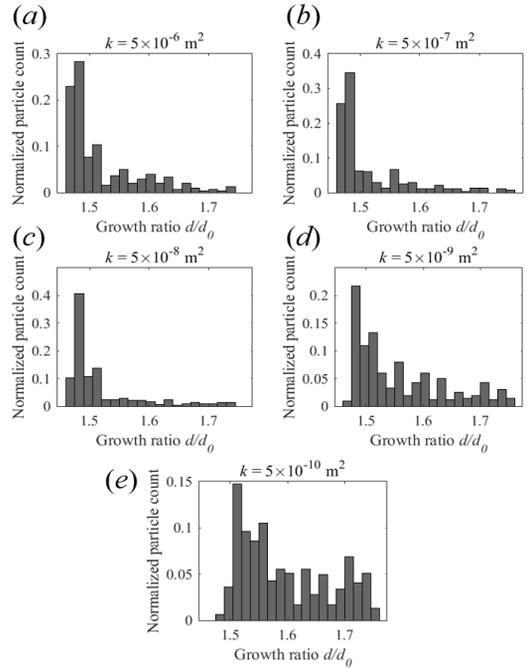


Fig. 7. Particle size distribution at the outlet for cases with different permeability of the porous material ($t = 1 \text{ s}$). (a) $k = 5 \times 10^{-6} \text{ m}^2$, (b) $k = 5 \times 10^{-7} \text{ m}^2$, (c) $k = 5 \times 10^{-8} \text{ m}^2$, (d) $k = 5 \times 10^{-9} \text{ m}^2$, (e) $k = 5 \times 10^{-10} \text{ m}^2$.

Fig. 7은 다공성 물질의 투과도 별 입자 크기의 분포를 나타낸다. 투과도가 큰 경우 입자 크기가 낮은 범위에 집중되어있는 것에 반해 투과도가 작아짐에 따라 크기 분포가 점차 균질해짐을 확인할 수 있다. 이 역시 불균일한 유동을 따라 미세 입자의 불규칙한 확산이 활발해지고 체류 시간이 증가하기 때문이다.

4. 결론

본 연구에서는 미세 입자가 포함된 관내 유동에서 상대습도가 입자의 응축성장률에 미치는 영향을 확인하였으며, 관내에 다공성 물질이 존재하는 경우 투과도가 응축성장률 및 내부 유동에 일으키는 변화를 조사하였다. 상대습도가 증가함에 따라 응축성장률이 증가하였으며, 크기의 분포 양상에는 큰 차이가 없는 것으로 나타났다. 이는 미세 입자의 응축성장을 연구한

기존의 여러 연구와 부합하는 결과이다.

관내에 다공성 물질이 유동의 흐름을 방해하는 경우 물질의 투과도가 낮을수록 더 큰 압력 강하와 불균일한 유동이 발생하였다. 이에 의해 미세 입자의 불규칙한 확산이 더 활발해지고 관내 체류 시간이 증가하였음을 확인하였다. 이는 결과적으로 평균적인 응축성장률의 증가 및 입자 크기 분포의 균질화를 일으켰다.

REFERENCE

- 1) Marple, V. A. and Willeke, K., 1967, "Impactor design," *Atmos. Environ.*, Vol. 10, pp. 891-896.
- 2) Friedlander, S. K., 2000, "Smoke, dust, and haze: Fundamentals of aerosol behavior (second ed.)," Oxford University Press, New York, pp. 249-257.
- 3) Okuyama, K., Kousaka, Y. and Motouchi T., 1984, "Condensational growth of ultrafine aerosol particles in a new particle size magnifier," *Aerosol Sci. Tech.*, Vol. 3, pp. 353-366.
- 4) Petzold A. et al., 2005, "On the effects of organic matter and sulphur-containing compounds on the CCN activation of combustion particles," *Atmos. Chem. Phys.*, Vol. 5, pp. 3198-3203.
- 5) Becker, S. M. and Kuzetsov, A. V., 2015, "Heat transfer and fluid flow in biological processes," Academic Press, Boston.
- 6) Pyo, J. et al., 2017, "Development of filter-free particle filtration unit utilizing condensational growth: With special emphasis on high-concentration of ultrafine particles," *Build Environ.*, Vol. 112, pp. 200-208.
- 7) Brenguier, J. L., 1991, "Parameterization of the condensation process: A theoretical approach," *J. Atmos. Sci.*, Vol. 48, pp. 264-282.
- 8) Woo, M. et al., 2021, "Open-source modelling of aerosol dynamics and computational fluid dynamics: Nodal method for nucleation, coagulation, and surface growth," *Comput. Phys. Commun.*, Vol. 261, 107765.
- 9) Fox, R. O., 2008, "A quadrature-based third-order moment method for dilute gas-particle flows," *J. Comput. Phys.*, Vol. 277, 6313-6350
- 10) Darcy, H., 1856, "Les fontaines publiques de la ville de Dijon. Paris: Dalmont.
- 11) Weller, H. G. et al., 1998, "A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques," *Comput. Phys.*, Vol. 12, 620.
- 12) Longest, P. W. and Kleinstreuer, C., 2005, "Computational models for simulating multicomponent aerosol evaporation in the upper respiratory airways," *Aerosol Sci. Tech.*, Vol. 39, pp. 124-138
- 13) Clift, R., Grace, J. R., and Weber, M. E., 1978, "Bubbles, drops, and particles," Academic Press, New York,
- 14) Ferron, G., Kreyling, W., and Haider, B., 1988, "Inhalation of salt aerosol particles-II. Growth and deposition in the human respiratory tract," *J. Aerosol Sci.*, Vol. 19, pp. 611-631.
- 15) Fuchs, N. A., and Sutugin, A. G., 1969, "Highly dispersed aerosols," Ann Arbor Science Publishers, Michigan.
- 16) Chen, X. et al., 2017, "Numerical investigation of the interaction, transport and deposition of multicomponent droplets in a simple mouth-throat model," *J. Aerosol Sci.*, Vol. 105, pp. 108-127.
- 17) Longest, P. W., McLeskey, J. T., and Hindle, M., 2010, "Characterization of nanoaerosol size change during enhanced condensational growth," *Aerosol Sci. Tech.*, Vol. 44, pp. 473-483.