

<학술논문>

DOI:10.3795/KSME-B.2009.33.10.811

Brownian Dynamics 를 이용한 입자 포집 과정 및 여과 성능 해석

방종근[†] · 윤응섭^{*}

(2009년 8월 5일 접수, 2009년 9월 24일 수정, 2009년 9월 24일 심사완료)

Analysis of Filtration Performance by Brownian Dynamics

Jong-Geun Bang and Yoong-Sup Yoon

Key Words : Filtration(여과), Collection Efficiency(포집 효율), Morphology(포집 형상), Brownian Dynamics(브라운 동역학), Lattice Boltzmann Method(격자 볼츠만 방법)

Abstract

In the present study, deposition of discrete and small particles on a filter fiber was simulated by stochastic method. Trajectory of each particle was numerically solved by Langevin equation. And Lattice Boltzmann method (LBM) was used to solve flow field around the filter collector for considering complex shape of deposit layer. Interaction between the flow field and the deposit layer was obtained from a converged solution from an inner-loop calculation. Simulation method is properly validated with filtration theory 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. 서론

필터를 이용한 미세 먼지의 여과는 편리하고 경제적이므로 에어컨, 자동차 배기 저감 장치, 산업체의 매연 집진 설비 등 입자의 제거가 필요한 분야에 널리 사용되고 있다.

필터는 사용 목적에 따라 섬유질, 세라믹, 금속 등 재질이 다양하고 필터 소재 내부의 형상은 복잡하며 비균질하다. 또한 필터는 무수히 많은 공극으로 구성되어 있으며 입자의 포집은 수 마이크로 크기의 공극 내에서 일어난다. 공극 내에서 발생하는 작은 스케일의 현상이 전체 필터의 성능에 영향을 미치므로 마이크로 스케일에서 입자의 포집 과정을 이해하고 좀 더 큰 스케일의 연

구로 확장하는 과정이 필요하지만 지금까지 여과에 관한 대다수의 연구는 필터의 공학적 사용 목적으로 포집 효율과 압력 강하 등 거시적 성능 변수의 측정에 초점을 맞추어왔다. 이러한 필터의 성능 변수에 대한 연구는 필터 내에서 일어나는 포집 현상에 대한 정보를 제공하지는 못하고 필터의 설계 시 반복 실험과 시행착오에 의존하여 비효율적이고 필터의 성능을 최적화 하는데 한계를 가진다. 따라서 효율적인 필터의 설계와 성능 최적화를 위해서는 필터 공극 내에서 발생하는 입자의 운동, 입자와 포집기 간 충돌, 입자과 포집기 사이의 점착력, 포집된 입자층의 분포와 성장 과정 등에 대한 이해가 필요하다.

일반적으로 널리 사용되는 섬유질 필터의 경우 공극률이 크므로 각 공극에서 일어나는 입자의 여과 과정이 다른 공극의 입자 포집에 영향을 미치지 않고 독립적으로 이루어진다. 따라서 필터는 수많은 포집기의 결합으로 구성되어 있다고 가정하고 단일 포집기를 기초로 하여 필터의 연구를 수행한다. 필터의 포집 이론에서 입자가 포집기에 포집되는 원인을 관성, 간섭, 확산 등의

[이 논문은 2009년도 신재생에너지기술개발사업(2009. 5. 21., BEXCO) 발표논문임]

[†] 책임저자, 회원, 연세대학교 대학원 기계공학부

E-mail : jgbang81@gmail.com

TEL : (02)2123-4812 FAX : (02)312-2159

^{*} 회원, 연세대학교 기계공학부

각 포집 메커니즘으로 나누고 입자의 포집은 이들의 조합에 의해 이루어진다고 가정하였다. 즉, 개별 포집 메커니즘 별로 포집 효율을 정확하게 예측하는데 연구의 초점을 맞춰왔다.^(1,2) 하지만 입자의 포집은 여러 가지 물리적 현상들이 동시에 일어나는 과정으로 각 포집 메커니즘 별로 구분하여 결합하는 것은 인위적인 방법이다. 또한 고전적인 포집 이론은 포집기 위에 형성된 입자층의 성장을 고려하지 않아 초기 상태의 필터만 다룰 수 있다는 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 포집 과정에 대한 연구가 수행되었지만 Ermak⁽³⁾가 브라운 운동을 고려하기 위해 입자의 랜덤한 운동에 몬테카를로 기법을 적용하여 입자의 입자의 궤적을 해석하였다. Gupta⁽⁴⁾는 이를 전기장 내 입자의 포집 모델에 적용하였고 Ramarao⁽⁵⁾는 Kuwabara 모델을 이용해 유동장 내에서 입자의 포집 과정을 모사하고 입자의 포집 효율을 계산하였지만 입자의 포집에 의한 유동장의 변화는 고려하지 못하였다. Lantermann⁽⁶⁾은 포집된 입자층의 성장에 의한 유동장의 변화를 고려하기 위하여 격자 볼츠만 방법(Lattice Boltzmann method)을 적용하여 유동장을 해석하고 그물 모양 필터에 입자가 포집된 모습과 포집 효율을 계산하였다.

본 논문에서는 섬유질 필터에서 입자 포집 과정을 모사하기 위하여 격자 볼츠만 방법을 이용하여 포집기 주위를 지나는 유동장을 해석하고 브라운 동역학(Brownian dynamics)을 적용해 입자의 궤적을 계산하였다. 또한 입자와 포집기 사이의 상호작용은 분자 간의 인력(London force)을 이용한 간단한 모델을 사용하여 고려하였다. 이를 통해 입자의 여과 과정 중 포집 입자층의 형상 변화를 관찰하고 포집 효율을 계산하였으며 입자층의 성장이 포집 효율에 미치는 영향을 알아보았다.

2. 해석 방법

필터를 통과하는 입자는 필터 내 공극을 구성하는 포집기의 표면 혹은 이미 포집기에 포집된 입자 위에 부착되어 입자층을 형성한다. 여과 과정이 진행되면서 포집된 입자층은 점차 성장하고

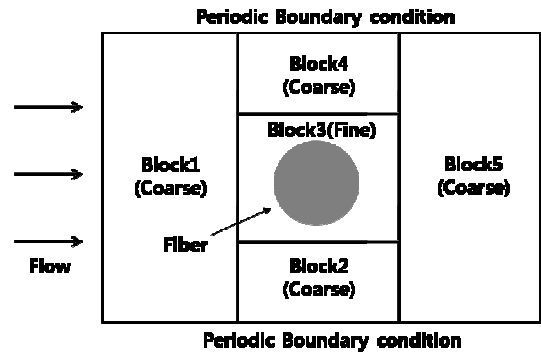


Fig. 1 Simulation domain and multi block(Block 1,2,4,5 is coarse and block 3 is fine)

전체 포집기의 형상과 포집기 주위를 흐르는 유동장이 변한다. 유동장의 변화는 필터 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 제대로 모사하기 위해서는 이들간 상호작용을 고려하여 해석해야 한다.

본 논문에서는 포집기 주위를 흐르는 유동장을 해석하고 필터 내에서 움직이는 입자의 궤적을 계산하기 위하여 격자 볼츠만 방법과 브라운 동역학을 이용해 수치 해석 프로그램을 작성하고 입자의 여과 과정을 모사하였다. 우선 입자가 포집되지 않은 깨끗한 포집기를 대상으로 유동장을 해석하고 계산한 유동장을 가지고 입자의 여과 과정 계산을 수행한다. 다수의 입자가 포집되어 포집기의 형상이 변하면 새로운 고체 경계 조건을 적용하여 유동장을 다시 계산하고, 새로 계산한 유동장을 이용해 입자의 운동을 계산한다. 여과 과정의 계산이 끝날 때까지 유동장 계산과 포집 과정을 순차적으로 반복 수행하여 유동장의 변화, 입자의 운동과 포집의 상호작용을 고려하였다.

2.1 필터 포집기 주위의 유동장

포집기 위에 쌓이는 입자층은 복잡한 형상의 돌기를 만들며 성장하므로 일반적인 전산 유체 방법으로는 포집기 벽면의 경계 조건을 처리하는데 어려움을 가진다. 격자 볼츠만 방법은 분자 기체 운동론에 이론적 기반을 둔 새로운 유동장 해석 기법으로 고체의 경계 처리가 쉬워 복잡한 형상의 물체 주위를 흐르는 유동장을 해석하는데 장점이 있다. 또한 필터를 통과하는 느린 유동에 적합하며 병렬 처리를 통한 대규모 계산에 용이하다. 따라서 포집기와 포집된 입자층 주위의 유

동장을 해석하기 위해 격자 볼츠만 방법을 적용하였다.

격자 볼츠만 방법은 Navier-Stokes 식을 푸는 대신 기체 분자의 위치와 속도 분포를 나타내는 Boltzmann 분포 함수를 이용해 유동장을 해석한다. 기체 분자가 주어진 격자 위에서 몇 개의 정해진 방향으로만 움직인다 가정하여 Boltzmann 식을 차분하면 식 (1)과 같다.

$$f_{\alpha}(x+e_{\alpha}\delta t, t+\delta t) - f_{\alpha}(x, t) = -\frac{1}{\tau} [f_{\alpha}(x, t) - f_{\alpha}^{(eq)}(x, t)] \quad (1)$$

위 식에서 f_{α} 은 위치, 시간에 대해 차분한 Boltzmann 분포 함수, $f_{\alpha}^{(eq)}$ 은 Boltzmann 평형 분포 함수, τ 은 이완 시간(relaxation time), e_{α} 은 Boltzmann 함수의 속도 단위 벡터이며 아래 첨자 α 는 특정 방향의 속도 벡터에 대한 분포 함수임을 뜻한다. 식 (1)에서 좌변은 어떤 격자의 기체 분자의 분포 함수가 주변의 격자로 전달되는 과정(streaming)이고 우변은 기체 분자끼리 서로 충돌하며 평형 상태에 도달하는 과정(collision)을 나타낸다. Boltzmann 평형 분포 함수는 식 (2)와 같다.

$$f_{\alpha}^{(eq)} = \rho w_{\alpha} \left[1 + \frac{3}{c^2} e_{\alpha} \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_{\alpha} \cdot u)^2 - \frac{3}{2c^2} u \cdot u \right] \quad (2)$$

여기서 ρ 는 유체의 밀도, u 는 유체의 속도 벡터, c 는 격자 간격과 시간 간격의 비, w_{α} 는 사용한 격자 모델에 따라 바뀌는 변수이다. 유체의 밀도와 속도는 (3)과 (4)의 방법으로 구한다.

$$\rho = \sum_{\alpha=0}^N f_{\alpha} = \sum_{\alpha=0}^N f_{\alpha}^{(eq)} \quad (3)$$

$$\rho u = \sum_{\alpha=1}^N e_{\alpha} f_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^N e_{\alpha} f_{\alpha}^{(eq)} \quad (4)$$

격자 볼츠만 방법에서는 경계 조건의 손쉬운 처리를 위해서 계산 영역에 균일한 크기의 격자를 적용하여 유동장을 해석한다. 필터 포집기에 포집된 입자층이 유동장에 미치는 영향을 고려하기 위해서는 입자의 크기보다 작은 크기의 격자를 사용해 유동장을 해석해야 하는데 계산 영역 전체에 촘촘한 격자를 사용하면 계산해야 할 격자의 개수가 지나치게 많아서 계산 시간이 오래 걸린다. 따라서 Fig. 1 과 같이 계산 영역을 여러 개의 블록으로 나누고 속도 및 압력 구배가 작은 바깥 블록에는 큰 간격의 격자를 사용하여 계산 부하를 줄이고 입자의 포집이 일어나는 가운데 블록에는 촘촘한 격자를 주어 유동장 계산을 위한 해상도를 높였다.⁽⁷⁾ 유체는

왼쪽에서 오른쪽으로 흐르고 전체 계산 영역의 위와 아래쪽 경계에는 주기 경계 조건을 적용하여 계산하려는 포집기의 위와 아래에 위치한 포집기가 유동장에 미치는 영향을 고려하였다.

2.2 입자의 운동 방정식

대기 중 입자의 크기는 수 나노 미터에서 수백 마이크로 미터 사이의 넓은 범위에 걸쳐 분포한다. 입자의 크기가 작을 때, 입자는 공기 분자의 충돌에 의해 브라운 운동이 매우 활발하며 브라운 운동은 입자의 크기가 커질수록 감소한다. 입자의 크기가 $1\mu\text{m}$ 이상일 경우 입자는 주로 입자의 관성과 공기의 저항에 의해 영향을 받으며 브라운 운동의 크기는 무시할 수 있을 정도로 작아진다. 입자의 크기에 따라 입자의 운동이 달라지고 그에 따라 입자의 궤적, 입자의 포집 과정이 영향을 받으므로 포집 과정을 정확히 모사하기 위해서는 입자의 운동에 영향을 미치는 물리적 현상을 적절히 고려하여 입자의 운동 방정식을 설정하고 풀어야 한다.

브라운 운동을 고려한 입자의 운동은 식 (5)의 Langevin 식으로 표현할 수 있다.

$$m_p \frac{dv(t)}{dt} = F_{\text{Drag}} + F_{\text{Ext}} + F_{\text{Brown}} \quad (5)$$

여기서 F_{Drag} , F_{Ext} , F_{Brown} 은 각각 저항력, 외력, 브라운 운동을 나타낸다.

입자의 운동 방정식의 해를 구하는 방법은 입자의 크기에 따라 두 가지로 구분할 수 있다. 우선 입자의 크기가 $1\mu\text{m}$ 이상이면 브라운 운동의 크기가 무시할 수 있을 만큼 작으므로 마지막 항을 생략하고 나머지 항을 Runge-Kutta 방법을 이용해 적분하여 미분방정식의 해를 구한다. 입자의 크기가 $1\mu\text{m}$ 이하로 브라운 운동이 매우 활발한 경우에는 브라운 운동의 시간 스케일이 공기의 저항력, 외력의 시간 스케일에 비해 매우 작으므로 짧은 시간 간격 동안 입자에 작용하는 저항력과 외력이 일정하다고 가정하고 운동 방정식을 수치적으로 적분하여 해를 구한다.⁽⁶⁾

$$v_{i+1} = v_i e^{-\beta \Delta t} + u(1 - e^{-\beta \Delta t}) + \frac{F_{\text{Ext}}}{m_p \beta} (1 - e^{-\beta \Delta t}) + R_{v_i} \quad (6)$$

$$r_{i+1} = r_i + \frac{v_i}{\beta} (1 - e^{-\beta \Delta t}) + u \left[\Delta t - \frac{1}{\beta} (1 - e^{-\beta \Delta t}) \right] + \frac{F_{\text{Ext}}}{m_p \beta} \left[\Delta t - \frac{1}{\beta} (1 - e^{-\beta \Delta t}) \right] + R_{r_i} \quad (7)$$

위 식에서 β 는 저항계수로 식 (8)과 같고

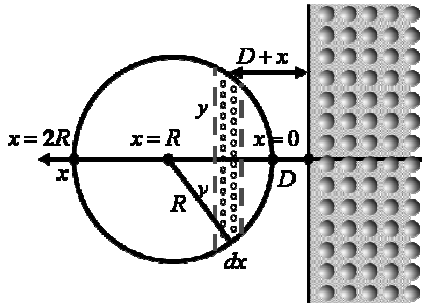


Fig. 2 Schematic of calculation of adhesion force

$$\beta = \frac{6\pi\mu r_p}{C_c m_p} \tag{8}$$

μ 은 유동장의 점성, C_c 는 Cunningham 보정 인자이다.

R_{vi} 와 R_{ri} 는 브라운 운동과 관련된 항으로 직접 적분하기 불가능하므로 통계적으로 처리한다. 식 (9)~(12)는 그 결과식을 나타낸다.

$$\begin{vmatrix} R_{vi} \\ R_{ri} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sigma_{vi} & 0 \\ \sigma_{vri} / \sigma_{vi} & (\sigma_{ri}^2 - \sigma_{vri}^2 / \sigma_{vi}^2)^{1/2} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} n_i \\ m_i \end{vmatrix} \tag{9}$$

$$\sigma_{vi}^2 = \frac{kT}{m_p} (1 - e^{-2\beta\Delta t}) \tag{10}$$

$$\sigma_{ri}^2 = \frac{kT}{\beta^2 m_p} (2\beta\Delta t - 3 + 4e^{-\beta\Delta t} - e^{-2\beta\Delta t}) \tag{11}$$

$$\sigma_{vri} = \frac{kT}{\beta m_p} (1 - e^{\beta\Delta t})^2 \tag{12}$$

위 식에서 n_i, m_i 은 Gaussian random 변수이고 k 는 Boltzmann 상수, T 는 온도이다.

본 논문에서는 10nm 에서 1 μ m 사이의 입자를 다루고 있으며 통계적 방법을 이용해 브라운 운동을 고려한 입자의 운동 방정식의 해를 구하고 입자의 궤적을 계산하였다.

2.3 입자와 필터 벽면과의 점착력

공기 중 부유 입자와 필터 포집기의 표면 또는 부유 입자와 포집기 위에 이미 포집된 입자 사이에 작용하는 점착력(adhesion force)는 입자의 포집 과정에 매우 중요한 역할을 한다. 입자는 생성 과정에 따라 구형, 긴 막대 모양, 혹은 복잡한 프랙탈 구조 등 다양한 형상을 갖지만 본 논문에서는 입자를 단순히 구형으로 가정하였다. 필터 포집기의 지름은 입자의 지름에 비해 훨씬 크므로 평면으로 가정할 수 있고 입자와 포집기를 구성하는 분자들 간에 작용하는 London 힘을 기하학적으로 적분하여 점착력을 간단한 식으로 모델링하였다.⁽⁸⁾

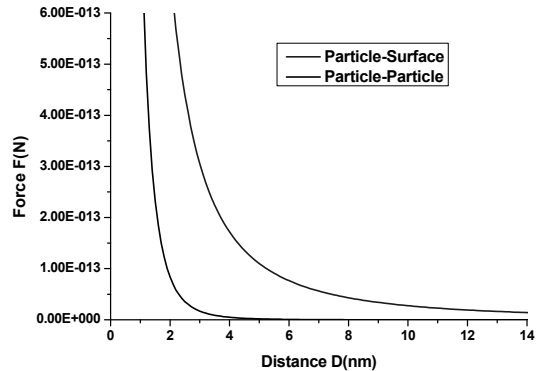


Fig. 3 Adhesion force between particle and filter collector surface

$$F_{vdw_PS} = \frac{2A}{3} \frac{r_p^3}{d^2(d+2r_p)^2} \tag{13}$$

$$F_{vdw_PP} = \frac{32A}{3} \frac{r_p^6}{d^2(d+4r_p)^2(d+2r_p)^3} \tag{14}$$

위 식에서 F_{vdw_PS} 는 부유 입자와 필터 표면, F_{vdw_PP} 는 부유 입자와 포집 입자 사이의 힘, A 는 Hamaker 상수, r_p 는 입자의 반지름, d 는 입자와 필터 표면 사이의 거리이다.

Fig. 3 은 계산에 사용한 입자와 필터 사이의 점착력이 입자와 필터 표면 사이의 거리에 따라 어떻게 변하는지 보여준다. 입자와 필터가 멀리 떨어져 있을 때, 입자에 작용하는 인력이 매우 약하므로 입자의 운동에 거의 영향을 미치지 않는다. 입자와 필터의 거리가 가까워지면 입자와 필터 사이의 인력이 급격하게 커진다.

일반적으로 입자의 운동 에너지가 입자와 필터 표면 사이의 부착 에너지보다 클 때(예를 들면 입자의 속도가 빠르거나 입자의 크기가 큰 경우), 입자는 필터 표면에 부착되지 않고 튕겨져 나오는 것으로 알려져 있다. 하지만 본 논문에서 사용한 부착력 모델에서는 Fig. 3 에서 보는 것처럼 입자와 필터의 거리가 가까워지면 입자와 필터 사이에 작용하는 힘이 무한대가 되므로 한번 필터의 표면에 부착된 입자는 다시 떨어져 나가지 않으며 입자의 되튀김 효과를 고려하지 못하는 한계를 가진다. 필터에 부착된 입자가 유동장의 전단력에 의해 다시 떨어져 나가는 현상 역시 고려하지 못하며 향후 연구에서 개선해야 할 부분이다. 입자와 필터는 하전되지 않아 전기적으로 중성을 가진다고 가정하였다.

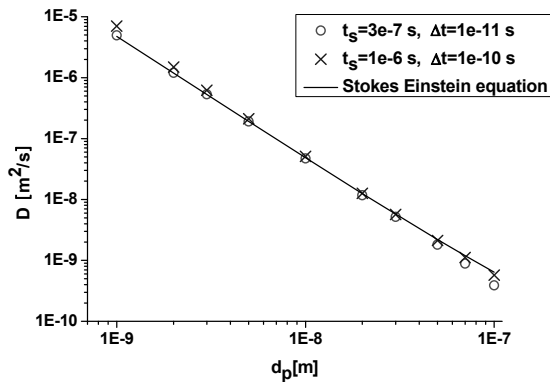


Fig. 4 Comparison of particle diffusion coefficient

3. 결과 및 토의

3.1 입자 확산 계수

입자의 확산은 미시적 관점에서 볼 때 각 입자의 무질서한 브라운 운동에 의해 발생한다. 따라서 작성한 코드가 입자의 브라운 운동을 제대로 모사하는지 확인하기 위하여 확산 계수를 수치적으로 계산하고 이를 이론식과 비교하였다.

유동장이나 외력의 영향 없이 단지 브라운 운동에 의해서 불규칙하게 움직이는 1000 개의 입자들의 변위를 측정하고 이를 식 (15)을 이용해 평균하여 입자의 확산계수를 계산하였다. Δt_{sample} 은 확산 계수의 계산을 위한 변위의 측정 시간으로 시간 간격에 따라 3×10^{-7} 초와 1×10^{-6} 초 두 경우에 대해 계산을 수행하였다.

$$D = \frac{\langle x^2 \rangle}{6\Delta t_{sample}} \quad (15)$$

수치 계산과 비교한 확산 계수의 이론식은 아래 식과 같고 온도 조건은 상온이다.

$$D = \frac{kTC_c}{6\pi\mu r_p} \quad (16)$$

Fig. 4 은 서로 다른 두 시간 간격에 대해 수행한 확산 계수와 이론식의 비교 그래프로 계산한 결과가 이론식과 잘 일치함을 보여준다. 입자의 크기가 커질수록 브라운 운동과 입자 확산 계수가 작아지며 로그 스케일 상에서 선형적으로 감소한다.

3.2 입자의 궤적 및 포집

입자의 크기에 따라 입자의 운동이 어떻게 달라지는지 알아보기 위해 입자의 크기를 바꿔가며 입자의 궤적을 계산하고 입자의 포집 과정과 입자층

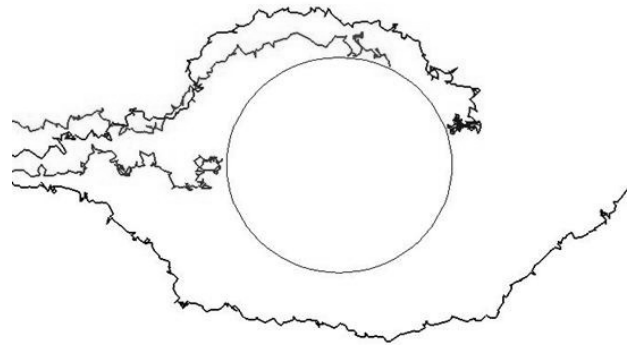


Fig. 5 When $d_p=0.01\mu\text{m}$, trajectory of particle

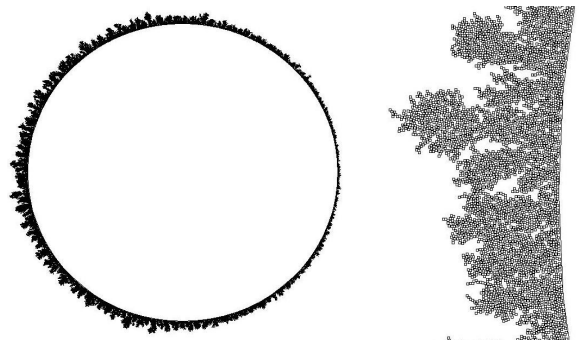


Fig. 6 When $d_p=0.01\mu\text{m}$, morphology of particle deposit layer(left) and larger view of deposit layer(right)

의 분포를 관찰하였다. 입구 유속은 0.3m/s , 포집기의 지름은 $10\mu\text{m}$ 로 일정하게 고정하였으며 입자는 포집기에 의해 유동장이 영향을 받지 않을 만큼 떨어진 곳(포집기의 표면에서 유동장의 상류 방향으로 포집기 지름의 2 배 거리)에 랜덤하게 뿌려주었다.

Fig. 5 는 입자의 지름이 $0.01\mu\text{m}$ 일 때 입자의 궤적을 보여준다. 입자는 전반적으로 유동장을 따라 움직이지만 브라운 운동의 영향으로 매우 불규칙하며 순간적으로 유동장과 반대 방향으로 움직이기도 한다. 같은 초기 위치에서 출발한 입자라도 브라운 운동의 영향으로 서로 다른 궤적을 가지며 입자의 크기가 작아 브라운 운동이 매우 활발한 경우에는 입자의 초기 위치가 입자의 궤적과 포집 과정에 미치는 영향이 상대적으로 작음을 알 수 있다. 입자의 지름이 $0.01\mu\text{m}$ 일 때, 입자는 브라운 운동의 영향으로 필터의 표면 전체에 뿔뿔히 포집된다.(Fig. 6) 하지만 유동이 들어오는 필터의 전면에 좀 더 많은 입자가 포집되며 포집층의 성장속도 역시 전면부가 빠르다. 포집된 입자층을 확대해보면 긴 돌기를 형성하며 성장함을 알 수 있다.

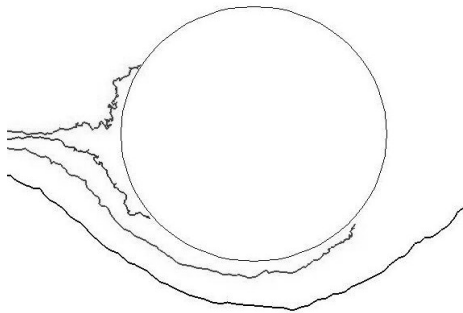


Fig. 7 When $d_p=0.05\mu\text{m}$, trajectory of particle



Fig. 8 When $d_p=0.05\mu\text{m}$, morphology of particle deposit layer

입자의 크기가 $0.05\mu\text{m}$ 로 좀 더 커지면(Fig. 7), Fig. 8) 브라운 운동의 크기는 작아지지만 여전히 눈으로 확인 가능하며 입자는 포집기의 후면에도 부착된다. 입자는 포집 초기에 필터의 표면 전체에 포집되고 작은 돌기를 만들며 성장한다. 필터의 양 옆에 길게 성장한 돌기는 주위를 지나가는 입자의 궤적을 방해하여 더욱 더 길게 성장하며 필터 후면에 입자가 포집되는 것을 막아 결국 입자층의 성장은 필터의 전면과 필터 양 옆의 돌기에서만 이루어진다. 필터의 양 옆으로 길게 성장하는 돌기는 입자의 분포를 바꿔가며 수행한 여러 번의 반복 계산을 통해서도 여전히 확인할 수 있었으며 Fig. 8 은 입자의 지름이 $0.05\mu\text{m}$ 일 때의 전형적인 포집 형상을 보여준다. 포집기 후면에 부착된 입자, 포집기의 양 옆으로 길게 성장하는 돌기, 포집기 전면부의 정체점 근처에 성장하는 돌기로 미루어보아 확산, 간섭, 관성에 의한 포집이 동시에 작용하고 있음을 알 수 있다.

입자의 크기가 $0.8\mu\text{m}$ 일 때(Fig. 9), 브라운 운동은 무시할 수 있을 만큼 작아지고 입자의 궤적은 입자의 초기 위치에 의해 결정된다. Fig. 10 은 입자의 포집 과정을 유동장의 변화와 함께 나타내었다. 포집 초기에 입자는 포집기 전면부에 몇 개

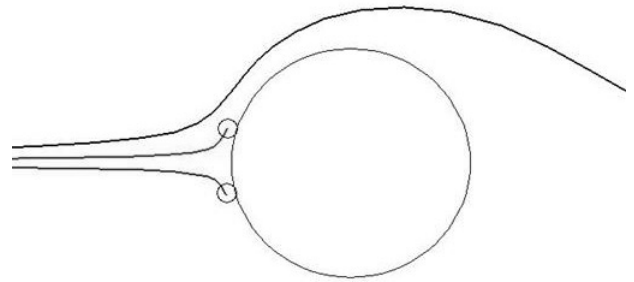


Fig. 9 When $d_p=0.8\mu\text{m}$, trajectory of particle

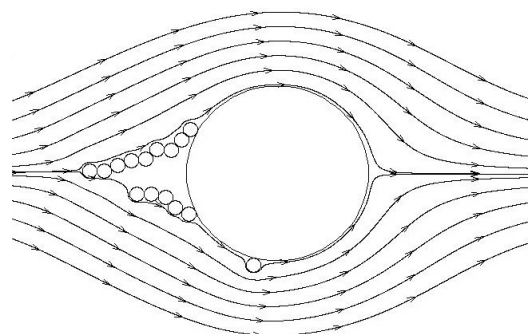
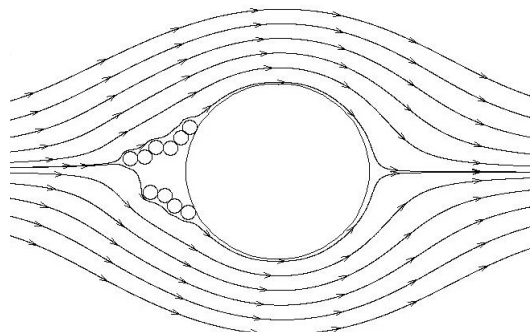
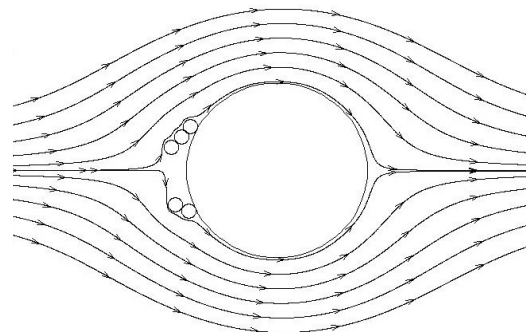


Fig. 10 When $d_p=0.8\mu\text{m}$, morphology of particle deposit layer

의 돌기를 만들며 성장한다. 포집기에 포집된 입자가 유동장이 교란하여 돌기는 순차적으로 서로 경쟁하며 성장하다가 돌기는 지그재그 모양을 가진다. 서로 경쟁하며 성장하던 돌기 중 하나가 다른 돌기의 성장을 방해할 만큼 길어지면 긴 돌기에만 입자가 포집되며 입자층이 성장한다.

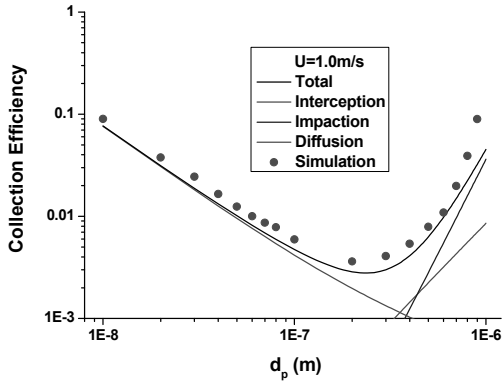


Fig. 11 Comparison of collection efficiency between calculated results and filtration theory

3.3 필터 초기 포집 효율

필터의 성능 변수 중 하나인 초기 포집 효율을 계산하고 이를 필터의 포집 이론과 비교하였다. 입자의 크기를 변화시키며 포집 효율을 계산하였고 필터 포집기의 크기는 $10\mu\text{m}$ 로 고정하였다. 포집기를 지나는 유동장의 상류에 입자를 뿌려주고 포집기의 투과 면적을 통과하는 입자 중 포집기에 부착된 입자 개수의 비를 포집 효율로 정의하였다. 입자를 뿌려주는 초기 분포가 결과가 미치는 영향을 줄이기 위하여 입자의 초기 분포를 바뀌가면 50 번의 계산을 수행하고 이를 평균하였다.

포집 이론에 의한 포집 효율은 각 포집 메커니즘에 대한 포집 효율을 각각 구하고 이를 식 (17) 을 이용해 포집기의 전체 포집 효율을 계산하였다.

$$E_{\Sigma} = 1 - (1 - E_R)(1 - E_I)(1 - E_D) \quad (17)$$

여기서 E_R, E_I, E_D 는 각각 간섭, 관성, 확산에 의한 포집 효율을 나타내며 각 메커니즘에 의한 포집 효율은 아래와 같다.

$$E_R = \frac{(1 - \alpha)R^2}{Ku(1 + R)} \quad (18)$$

$$E_I = \frac{(Stk)J}{2Ku^2} \quad (19)$$

$$E_D = 2.58 \left(\frac{1 - \alpha}{Ku} \right)^{1/3} Pe^{-2/3} \quad (20)$$

위 식에서 α 는 필터의 고체 체적비, R 은 입자와 포집기 지름의 비, Stk 는 Stokes 수, Pe 는 Peclet 수, Ku 는 Kuwabara 계수이다.

$$Ku = -\frac{\ln \alpha}{2} - \frac{3}{4} + \alpha - \frac{\alpha^2}{4} \quad (21)$$

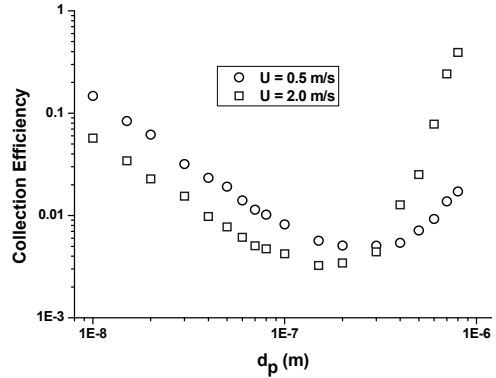


Fig. 12 Effect of face velocity on collection efficiency

J 는 크기에 따라 다음의 두 가지로 구분하여 사용하였다.

$$J = \begin{cases} (29.6 - 28\alpha^{0.62})R^2 - 27.5R^{2.8} & R < 0.4 \\ 2.0 & R > 0.4 \end{cases} \quad (22)$$

Fig. 11 은 수치 계산을 통해 얻은 입자의 초기 포집 효율과 포집 이론에 의한 초기 포집 효율의 비교 그래프이다. 계산을 통해 구한 초기 포집 효율은 포집 이론을 통해 얻은 값보다 다소 크지만 수치 계산 결과가 초기 포집 효율을 잘 예측하고 있음을 알 수 있다. 입자의 지름이 작을 때에는 확산에 의한 포집 메커니즘이 지배적이고 간섭, 충돌에 의한 포집은 거의 영향을 미치지 못하므로 포집 효율은 입자의 크기가 증가하면서 선형적으로 감소한다. 하지만 입자의 크기가 커질수록 간섭 혹은 충돌에 의한 입자의 포집 효율이 증가하므로 확산에서 간섭 혹은 충돌로 포집 메커니즘이 바뀌는 과정에서 필터의 초기 포집 효율은 입자의 크기가 $0.2\mu\text{m}$ 근처에서 최소값을 보인다. 입자의 크기가 더욱 커지면 입자는 충돌과 간섭에 의한 포집의 영향 아래 놓이게 된다.

Fig. 12 는 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 초기 포집 효율은 유동의 속도가 증가하면 입자의 확산에 의한 포집 효과를 상쇄하여 감소한다. 반면 입자의 크기가 큰 경우 유동의 속도가 증가하면 관성의 효과가 커져 포집 효율이 증가한다. 계산을 통해 유속이 빨라지면 초기 포집 효율이 최소가 되는 입자의 크기가 작아짐을 알 수 있다.

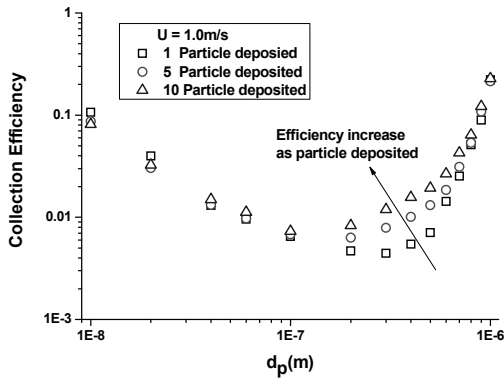


Fig. 13 Effect of particle loading on collection efficiency

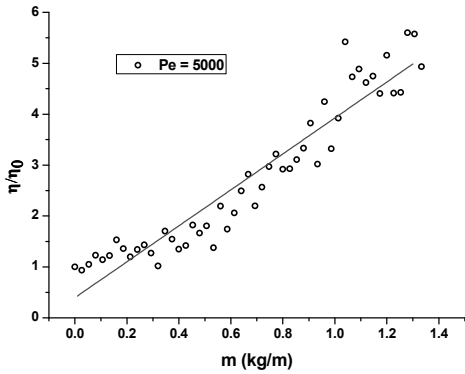


Fig. 14 Dynamic characteristic of filter collection efficiency

3.4 포집층 성장이 포집 효율에 미치는 영향

앞서 살펴본 초기 포집 효율은 입자가 거의 포집되지 않은 깨끗한 필터를 대상으로 포집된 입자층의 성장이 미치는 영향을 고려하지 않고 계산하였다. 지금까지 연구된 많은 포집 이론과 필터에 관한 연구 역시 포집층의 성장을 고려하고 있다. 포집 입자층의 성장은 필터의 포집 효율과 압력강하, 그리고 필터의 수명에 중요한 영향을 미친다. 따라서 본 연구에서는 입자층의 성장이 포집 효율에 어떤 영향을 주는 지 알아보기 위한 계산을 수행하였다.

Fig. 13 은 필터에 포집된 입자의 개수의 증가하며 포집 효율이 어떻게 변하는지 보여준다. 입자의 크기가 작을 때, 입자는 포집기 표면의 전 영역에 고르게 포집되고 포집된 입자의 크기가 작아서 포집기의 형상 변화 역시 작으므로 입자층의 성장이 필터의 포집 효율에 거의 영향을 미치지 않는다. 초기 포집 효율이 최소값을 보이는 입자 크기에서는 입자가 포집되면서 돌기가 필터의 양

옆으로 길게 성장하고 포집 효율이 빠르게 증가한다. 입자의 크기가 더욱 큰 경우에는 포집된 입자가 포집 효율에 미치는 영향이 다시 작아진다. 이는 간섭에 의한 포집이 지배적이고 입자는 포집기의 정체점 근처에 긴 돌기를 형성하며 성장하므로 이에 따른 그림자 효과(Shape effect)가 증가가 거의 없기 때문으로 생각된다.

Fig. 14 는 입자의 포집에 의해 포집 효율이 어떻게 증가하는지 알아보기 위하여 입자를 포집하며 그 때의 순간 포집 효율을 계산하였다. 수평축은 필터 위에 포집된 입자의 양을 질량으로 나타냈으며 수평축에 해당하는 양만큼 입자가 쌓인 상태의 순간 포집 효율을 초기 포집 효율로 무차원화하여 수직축에 표현하였다. 계산결과 입자의 포집 효율은 입자가 포집되면서 선형적으로 증가함을 알 수 있다.

4. 결론

브라운 운동을 고려한 입자의 궤적을 통계적 방법을 이용해 계산하고 입자의 포집 과정을 모사하였다. 입자의 포집에 의한 유동장의 변화를 고려하기 위해 격자 볼츠만 방법을 적용하여 유동장을 해석하였으며 입자가 포집되어 포집기의 형상이 바뀌면 새 고체 경계 조건을 적용하고 유동장을 다시 계산하여 포집기의 형상 변화와 유동장의 변화에 따른 포집 과정을 계산하였다. 입자의 크기에 따라 어떠한 포집 메카니즘이 지배적인가에 따라 입자의 포집 형상과 분포는 달라지며 포집된 입자는 긴 돌기를 형성하며 성장한다. 입자의 크기가 작을 때에는 포집된 입자는 필터 전체에 뿔뿔하지만 균일하게 포집되고 입자의 크기가 커져 입자의 확산이 약해지면 유동장의 유선이 꺾이는 필터의 양 옆으로 긴 돌기를 형성한다. 충돌에 의한 포집이 지배적인 입자 크기에서는 포집기의 정체점 근처만 길 돌기가 성장한다. 계산을 통해 예측한 초기 포집 효율은 포집 이론과 일치하는 결과를 보여주었으며 입자의 크기가 작을 때는 유속이 느릴수록, 입자의 크기가 클 때는 유속이 빠를수록 초기 포집 효율이 증가함을 확인 할 수 있었다. 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*.