

УДК 544.733.422:519.87

**Физико-математическая модель коагуляции
микронных и субмикронных аэрозолей
с учетом испарения и осаждения
при ультразвуковом воздействии***

О.Б. Кудряшова, А.А. Антонникова, С.С. Титов

Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН, Бийск

E-mail: antonnikova.a@mail.ru

Предложена физико-математическая модель, основанная на уравнении Смолуховского, описывающем динамику изменения функции распределения частиц аэрозолей по размерам с учетом ультразвукового воздействия, испарения (для жидкокапельных аэрозолей) и осаждения. Получены выражения для кинетики коагуляции в зависимости от основных параметров воздействия, свойств аэрозоля и среды: концентрации и дисперсного состава исходного аэрозоля, вязкости и температуры среды, физико-химических параметров материала частиц. Результаты расчетов, полученные с применением предложенной модели, соответствуют экспериментальным данным.

Ключевые слова: аэрозоль, распределение по размерам, ультразвуковое воздействие, испарение, коагуляция, осаждение.

Проблема очистки воздушного бассейна от загрязнения промышленными аэрозолями (как жидкокапельными, так и твердофазными) в настоящее время крайне актуальна. Это связано с тем, что гигантские по массе выбросы представляют непосредственную угрозу как для человека, так и для биосферы в целом. Одним из возможных направлений решения проблемы очистки является применение ультразвуковой (УЗ) коагуляции аэрозолей.

Математические модели [1, 2] используют балансовый подход Смолуховского в сочетании с выкладками ортокинетической и гидродинамической гипотез взаимодействия частиц. Полученные в работах выражения не позволяют просмотреть асимптотические закономерности, и для прогнозирования процессов коагуляции аэрозолей приходится либо проводить численный эксперимент, либо пользоваться более наглядными, но необоснованными физически интерполяционными формулами, описывающими физический эксперимент.

Рассмотрим трансформацию распределения частиц по размерам с течением времени. Следуя работам [3, 4], запишем балансовое уравнение (интегральный вариант уравнения Смолуховского), описывающее изменение со временем функции распределения частиц по размерам:

$$\partial f(D, t) / \partial t = I_1 + I_2 + I_3, \quad (1)$$

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-08-90811-мол_рф_нр).

где I_1 описывает убыль частиц с диаметром D за единицу времени в единице объема за счет столкновения капли диаметра D с любой каплей диаметра D_1 :

$$I_1 = -f(D, t) \int_0^{D_{\text{кр}}(t)} K(D, D_1) f(D_1, t) dD_1,$$

где $K(D, D_1)$ — вероятность столкновений частиц, $D_{\text{кр}} = \sqrt{9\eta H / 2g\rho_q t}$, где H — верхняя граница облака, g — ускорение свободного падения, ρ_q — плотность частицы. Все частицы, масса которых превышает критическое значение $D_{\text{кр}}(t)$, выпадают в осадок и не принимают дальнейшего участия в коагуляции; спектр частиц на каждый момент времени t будет обрезан справа за счет седиментации крупных частиц, причем постепенно эта граница будет смещаться в сторону все более мелких частиц.

Член I_2 описывает возникновение частиц диаметра D за счет столкновения капель с диаметрами D_1 и $D - D_1$:

$$I_2 = \frac{1}{2} \int_0^D K(D - D_1, D_1) f(D_1, t) f(D - D_1, t) dD_1.$$

Член I_3 описывает уменьшение массы частиц за счет их испарения:

$$I_3 = \frac{\partial}{\partial m} \left(\frac{dm}{dt} f(D) \right) = \frac{\partial}{\partial m} \left[\frac{2\pi D_f M (p_{\text{drop}} - p_{\text{pl}}) f(D)}{RT} \right],$$

где m — масса капли, D_f — коэффициент диффузии, M — молекулярная масса жидкой капли, R — универсальная газовая постоянная, T — абсолютная температура, p_{drop} и p_{pl} — парциальное давление над каплей и плоской поверхностью. Дроблением частиц за счет движения пренебрежем (число Вебера $We < 17$). В модели (1) облако аэрозоля будем считать равномерным по концентрации и допустим, что каждое столкновение частиц приводит к их слипанию.

Экспериментально установлено, что акустическое (ультразвуковое) воздействие ускоряет коагуляцию и осаждение аэрозолей [1]. В терминах предлагаемой модели ультразвук увеличивает вероятность столкновений частиц. Для понимания процесса взаимодействия акустического поля и аэрозоля важно связать основные параметры УЗ-воздействия с вероятностью столкновений $K(D, D_1)$ и, следовательно, со скоростью коагуляции и осаждения.

В работе [4] вероятность столкновений частиц аэрозоля считалась пропорциональной сумме масс частиц:

$$K(D, D_1) = \frac{k_b n_0}{\nu} (D^3 + D_1^3), \quad (2)$$

где k_b — коэффициент пропорциональности, n_0 — концентрация частиц, ν — кинематический коэффициент вязкости среды. В случае УЗ-воздействия вероятность столкновений повышается пропорционально амплитуде акустических колебаний и коэффициенту обтекания $k_{\text{обт}}$ [5]. В соответствии с ортокинетической гипотезой взаимодействия частицы и акустического поля получена формула для коэффициента увлечения в виде [6]:

$$k_{\text{увл}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \omega^2 \tau^2}}, \quad (3)$$

где $k_{\text{увл}}$ — отношение амплитуды скорости взвешенной частицы к амплитуде скорости частицы газа, ω — частота акустического воздействия, $\tau = \rho_{\text{ч}} D^2 / 18\eta$ — время релаксации стоксовой частицы, η — динамический коэффициент вязкости среды

$$k_{\text{обт}}^2 = (1 - k_{\text{увл}})^2. \quad (4)$$

Таким образом, с учетом формул (2)–(4) получаем выражение для вероятности столкновений частиц в аэрозоле под действием ультразвука:

$$K(D, D_1) = \frac{k_b n_0}{v} (D^3 + D_1^3) \left(1 + k_a U_0^2 \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \omega^2 \tau^2}} \right)^2 \right).$$

Начальные условия для уравнения (1): при $t = t_0$ начальное распределение частиц по размерам $f(D, t_0) = f_0(D)$. Для описания функции распределения частиц по размерам часто применяют гамма-распределение: $f_0(D) = aD^\alpha \exp(-bD)$, где b , α — параметры распределения, a — нормировочный коэффициент [7]. В качестве характерного размера данного распределения можно выбрать модальный диаметр $D_0 = \alpha/b$.

Уравнение (1) решалось численно методом Рунге–Кутты 2 порядка, входящие в уравнение интегралы считались методом прямоугольников.

Рисунок 1 иллюстрирует уменьшение массы субмикронного аэрозоля во времени в процессе коагуляции и испарения под действием ультразвука и без УЗ-воздействия. Параметры начального распределения частиц аэрозоля по размерам: $b = 1$, $\alpha = 0,1$. Неиспаряющийся аэрозоль (кривая 1) коагулирует и осаждается медленно, УЗ-воздействие существенно ускоряет этот процесс ($(\omega\tau)^2 = 2$, кривая 2). Быстро испаряющийся субмикронный водный аэрозоль теряет массу в результате испарения (кривая 3), УЗ-воздействие еще увеличивает скорость убыли массы аэрозоля (кривая 4). Эти расчеты соответствуют многочисленным экспериментальным данным, в том числе полученным авторами ранее [4]. В опытах, результаты которых приведены в работе [4], время полного осаждения аэрозоля (мука, вода) уменьшалось при УЗ-воздействии в 1,5–2 раза.

Начальный спектр распределения частиц по размерам претерпевает деформацию в течение времени. На рис. 2 приведено массовое распределение частиц по размерам для водяного аэрозоля в начальный момент времени (кривая 1) и через одну минуту при УЗ-воздействии для неиспаряемого (кривая 3) и испаряемого водного аэрозоля (кривая 2). Массовая функция распределения по размерам $g(D)$ связана со счетной

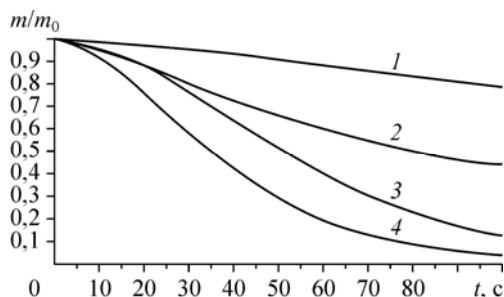


Рис. 1. Зависимость относительной массы аэрозоля от времени.

1 — без испарения и без УЗ-воздействия, 2 — без испарения, с УЗ-воздействием, 3 — с испарением (вода), без УЗ-воздействия, 4 — с испарением и с УЗ-воздействием.

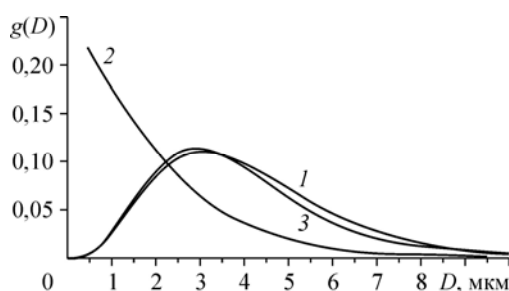


Рис. 2. Массовое распределение частиц по размерам при УЗ-воздействии.

1 — начальный момент времени, 2 — водный аэрозоль через 1 мин., 3 — неиспаряемый аэрозоль через 1 мин.

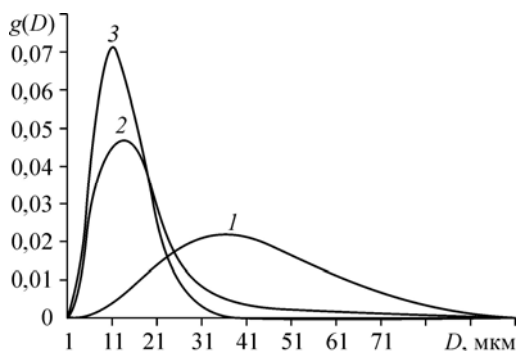


Рис. 3. Массовое распределение частиц по размерам для водного аэрозоля.

1 — начальный момент времени, 2 — расчет через 50 с, 3 — эксперимент через 50 с.

функцией $f(D)$ соотношением: $g(D) = m/m_{10}f(D)$, где m_{10} — среднеарифметическая масса частиц: $m_{10} = \int_0^{\infty} mf(D)dD$, m — масса частицы диаметра D .

Спектр распределения неиспаряемого аэрозоля за этот промежуток времени практически не изменился. Напротив, водяные капли из-за быстрого испарения сильно уменьшились в размерах, сместив максимум функции распределения в область $\sim 10^{-7}$ м.

Рисунок 3 иллюстрирует спектры распределения водного аэрозоля более крупной дисперсности, полученные как теоретически с использованием предложенной модели, так и экспериментально с помощью модифицированного метода малоуглового рассеяния [8]. Распыление проводилось пневматической форсункой, без УЗ-воздействия. Трансформация в данном случае происходила за счет испарения капель, начальное распределение (кривая 1) для расчетов бралась из эксперимента. Пики расчетного и экспериментального распределений совпадают, расхождение формы распределений объясняется особенностями математической реализации оптического метода измерений (аппроксимации на каждом временном шаге полученных экспериментальных данных функцией гамма-распределения).

Таким образом, предложена модель коагуляции аэрозоля под действием ультразвука в виде варианта интегрального уравнения Смолуховского со стоком (испарение) и обрезанием спектра (осаждение), учитывающего свойства аэрозоля и среды. Получено выражение для вероятности столкновений частиц аэрозоля в ультразвуковом поле. Проведены численные расчеты, качественно подтверждающие известные экспериментальные данные по осаждению аэрозолей в ультразвуковом поле.

Список литературы

1. Хмелев В.Н., Шалунова К.В., Цыганок С.Н., Барсуков Р.В., Сливин А.Н., Шалунов А.В. Ультразвуковая коагуляция аэрозолей: монография. Бийск: Изд-во АлтГТУ, 2010. 228 с.
2. Хмелев В.Н., Шалунов А.В., Голых Р.Н., Шалунова К.В. Теоретическое исследование процесса акустической коагуляции газодисперсных систем // Измерения, автоматизация и моделирование в промышленности и научных исследованиях (ИАМП-2010): Материалы VII-й Всероссийской науч.-техн. конф., Бийск, Россия, 6–7 октября 2010 г. Бийск: Изд-во АлтГТУ, 2010. С. 222–227.
3. Волощук В.М. Кинетическая теория коагуляции. Л.: Гидрометеиздат, 1984. 284 с.
4. Антонникова А.А., Кудряшова О.Б., Хмелев М.В., Шалунов А.В. Исследование эффективности применения ультразвуковых колебаний для осаждения мелкодисперсных аэрозолей // Научно-технический вестник Поволжья. 2011. № 6. С. 96–99.
5. Розенберг Л.Д. Физические основы ультразвуковой технологии. М.: Наука, 1970. 689 с.
6. Денисов А.С., Подольский А.А., Турубаров В.И. Об увлечении аэрозольных частиц в звуковом поле при числах Рейнольдса ≤ 1 // Акустический журнал. 1965. Т. 11, вып.1. С. 146–155.
7. Архипов В.А. Лазерные методы диагностики гетерогенных потоков. Томск.: Изд-во Томского университета, 1987. 140 с.
8. Ишматов А.Н., Ахмадеев И.Р., Ворожцов Б.И., Титов С.С., Кудряшова О.Б. Лазерная измерительная установка для исследования высококонцентрированных жидкокапельных аэрозолей // Датчики и системы. 2011. № 11. С. 61–63.

Статья поступила в редакцию 14 августа 2012 г.,
после доработки — 28 сентября 2012 г.