

УДК 544.733.422:519.87

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЭВОЛЮЦИИ АЭРОЗОЛЕЙ ПРИ УЛЬТРАЗВУКОВОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

О.Б. Кудряшова, А.А. Антонникова

Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН, г. Бийск

E-mail: olgakudr@inbox.ru

Математическая модель основана на уравнении Смолуховского, описывающем динамику изменения функции распределения частиц аэрозолей по размерам с учетом ультразвукового воздействия, испарения (для жидкокапельных аэрозолей) и осаждения. Проведено исследование асимптотического поведения функции вероятности столкновений частиц аэрозоля от частоты ультразвука.

Ключевые слова:

Аэрозоль, распределение по размерам, ультразвуковое воздействие, испарение, коагуляция, осаждение.

Key words:

Aerosol, size distribution, ultrasonic influence, evaporation, coagulation, sedimentation.

Процессу ультразвуковой (УЗ) коагуляции аэрозолей посвящено много работ. Многие авторы рассматривают процессы взаимодействия частиц теоретически, но результаты эксперимента, тем не менее, описываются эмпирическими формулами.

В работах [1, 2] приводятся математические модели, использующие балансовый подход Смолуховского в сочетании с выкладками ортокинетической и гидродинамической гипотез взаимодействия частиц. При этом проведено сравнение с экспериментом по оптимальным частотам и амплитудам звукового воздействия. Однако полученные выражения не наглядны, не позволяют проследить асимптотические закономерности, и для прогнозирования процессов коагуляции аэрозолей приходится либо проводить численный эксперимент, либо пользоваться более наглядными, но не обоснованными физически интерполяционными формулами, описывающими физический эксперимент.

В работе предложены выражения для кинетики коагуляции в зависимости от основных параметров воздействия, свойств аэрозоля и среды: частоты и амплитуды звуковых колебаний, концентрации и дисперсного состава исходного аэрозоля, вязкости и температуры среды, физико-химических параметров материала частиц.

Рассмотрим трансформацию распределения частиц в произвольном облаке по размерам с течением времени t . Следуя [3–5], запишем балансовое уравнение (интегральный вариант уравнения Смолуховского), описывающее изменение со временем функции распределения частиц по размерам:

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

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 :

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

где $K(D, D_1)$ – вероятность столкновений частиц;

$$D_{кр} = \sqrt{\frac{9\eta H}{2g\rho_c t}}; \quad H – \text{верхняя граница облака}; \quad g –$$

ускорение свободного падения; η – динамическая вязкость среды; ρ_c – плотность частицы. Все частицы, масса которых превышает критическое значение $D_{кр}(t)$, выпадают из облака 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 малых частиц.

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

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

Жидкие капли испаряются тем быстрее, чем меньше их размер, за счет кривизны поверхности. Член I_3 описывает уменьшение массы частиц за счет их испарения с учетом уравнения Кельвина для капиллярного эффекта:

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

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.

Член уравнения I_3 имеет смысл для жидкокапельных аэрозолей, состоящих из микронных и субмикронных капель, испарение для которых существенно из-за кривизны их поверхности, причем при невысокой влажности окружающей среды ($p_{drop} \gg p_{pl}$).

Начальные условия для уравнения (1): при $t=t_0$, $f(D, t_0) = f_0(D)$ – начальное распределение частиц

по размерам. Для описания функции распределения частиц по размерам обычно применяют гамма-распределение: $f_i(D) = aD^\alpha \exp(-bD)$, где b, α – параметры распределения; a – нормировочный коэффициент. В качестве характерного размера данного распределения можно выбрать модальный диаметр $D_0 = \alpha/b$.

Относительная концентрация аэрозоля уменьшается по сравнению с начальной n_0 за счет испарения и седиментации, и на момент времени t это уменьшение составит:

$$\frac{\Delta n}{n_0} = \int_0^t \left(\int_0^{D_{sp}(t)/D_0} I_3 dx + \int_{D_{sp}(t)/D_0}^{\infty} f(D, t) dx \right) dt. \quad (2)$$

Важным вопросом является определение вероятности столкновений частиц; чем она выше, тем быстрее произойдет коагуляция и осаждение аэрозоля. В отсутствие какого-либо воздействия эта величина обуславливается броуновским движением [3]. В работе [4] вероятность столкновений частиц аэрозоля без дополнительного воздействия считалась пропорциональной сумме масс частиц:

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

где k_b – коэффициент пропорциональности; ν – кинематический коэффициент вязкости среды.

В условиях ультразвукового воздействия повышается вероятность столкновений частиц. В выражение (3) должны войти параметры, характеризующие ультразвуковое воздействие, прежде всего амплитуда и частота излучения.

Согласно [6], коагуляцию можно рассматривать как образование агрегатов в звуковом поле в результате взаимодействия частиц, вызванного акустическими течениями вокруг них в звуковом поле. Следуя этой работе, рассчитаем число встреч частиц в звуковом поле, полагая, что частицы встретятся в том случае, если линия тока потока, возникающего около одной из частиц и увлекающего вторую, пройдет в «трубке» диаметром, равным двум диаметрам частицы $2D$. Число встреч на единицу длины выделенной частицы за единицу времени равно $N = dS n_0 U_0$, где dS – площадка, ограниченная линиями тока; U_0 – скорость движения частиц. При невысоких уровнях звукового давления в [6] получено, что число встреч пропорционально диаметру частиц, квадрату скорости их движения (которая, в свою очередь, определяется амплитудой звуковых колебаний), концентрации частиц, коэффициенту обтекания $k_{обр}$, и обратно пропорционально вязкости среды:

$$N \approx \frac{U_0^2 n_0 k_{обр}^2 (D^3 + D_1^3)}{\nu}. \quad (4)$$

Взвешенная в газе частица под действием сил звукового поля вовлекается в колебательное движение («ортокинетическая» гипотеза). В зависимости от свойств среды, размеров и плотности частицы она может увлекаться средой лучше или хуже,

что определяется коэффициентом увлечения $k_{увл}$ – отношение амплитуды скорости взвешенной частицы к амплитуде скорости частицы газа. Считая, что между частицей и средой действует сила Стокса, получим формулу для коэффициента увлечения в виде [7]:

$$k_{увл} = \frac{1}{\sqrt{1 + \omega^2 \tau^2}}, \quad (5)$$

где ω – частота акустического воздействия; $\tau = \rho_p D^2 / 18 \eta$ – время релаксации частицы; η – динамический коэффициент вязкости среды. Анализ этого выражения показывает, что амплитуда колебания частицы тем больше отличается от амплитуды колебания окружающей среды, чем больше размер и плотность частицы, чем выше частота звука и меньше вязкость.

Учитывая выражение для коэффициента увлечения частицы в звуковом поле (4), можно считать, что частица увлекается звуковым полем, повышая вероятность столкновений с фиксированной частицей в $k_{увл}^2 k_a (1 - k_{увл})^2$ раз, где k_a – коэффициент пропорциональности. Тогда вероятность столкновений частиц с диаметрами D и D_1 пропорциональна $N (1 - k_{увл})^2$, или, с учетом (2)–(5):

$$K(D, D_1) = \frac{k_b n_0}{\nu} (D^3 + D_1^3) \left(1 + k_a U_0^2 \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \omega^2 \tau^2}} \right)^2 \right). \quad (6)$$

Анализируя выражение (6), заметим, что:

- при отсутствии акустического поля ($k_a U_0^2 = 0$) вероятность столкновений сводится к броуновской (3);
- с повышением амплитуды воздействия (а значит, скорости U_0) вероятность повышается;
- акустическое воздействие с относительно низкими частотами ($\omega^2 \tau^2 \ll 1$) неэффективно ($k_{увл} \rightarrow 1, (1 - k_{увл}) \rightarrow 0$);
- существует оптимальная частота воздействия ($\omega^2 \tau^2 \gg 1$), наиболее эффективная с точки зрения коагуляции аэрозолей ($k_{увл} \rightarrow 0, (1 - k_{увл}) \rightarrow 1$).

Такое поведение функции (6) соответствует экспериментальным и теоретическим данным [1, 2, 4]. Пользуясь выражением (6), найдем предельно низкие (неэффективные) и оптимальные частоты ультразвукового воздействия:

$$\omega_{\min} = \frac{1}{\tau} \left[1 / \left(1 - \frac{\sigma(\sqrt{k_b n_0 D_0^3})}{U_0 \sqrt{k_a}} \right)^2 - 1 \right], \quad (7)$$

$$\omega_{\max} = \frac{1}{\tau} \left[\frac{1}{\sigma(1)} - 1 \right]. \quad (8)$$

Обозначим повышение вероятности столкновений частиц при ультразвуковом воздействии через

$$K: K_1 = \left(1 + k_a U_0^2 \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \omega^2 \tau^2}} \right)^2 \right). \text{ Поведение по-}$$

вышающего коагуляционного коэффициента в зависимости от частоты иллюстрирует рис. 1 (водный аэрозоль, $k_a U_0^2=1$).

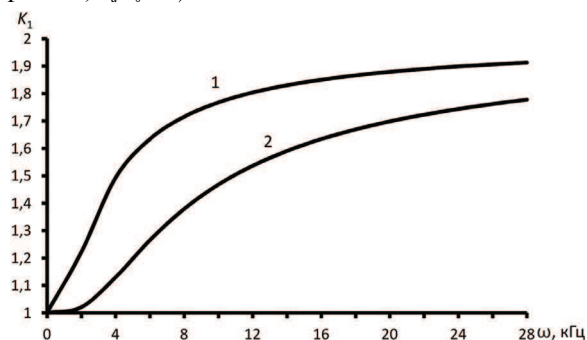


Рис. 1. Зависимость коэффициента K_1 от частоты УЗ-воздействия для водного аэрозоля: 1) $D=5$ мкм; 2) $D=1$ мкм

Расчет для водного аэрозоля минимальной и оптимальной частот воздействия по формулам (7) и (8) приведен на рис. 2.

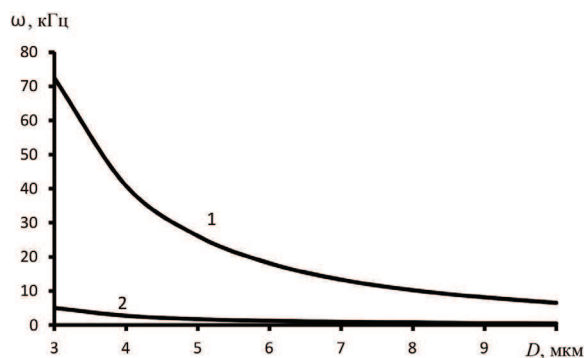


Рис. 2. Оптимальная (1) и минимальная частота (2) для водного аэрозоля

Рис. 3 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 осаждаются медленно; ультразвуковое воздействие существенно ускоряет этот процесс. ($(\omega\tau)^2=2$, кривая 2). Быстро испаряющийся субмикронный водный аэрозоль теряет массу в результате испарения (кривая 3); ультразвуковое 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 1,5–2,0 раза.

Начальный спектр распределения частиц по размерам претерпевает деформацию в течение времени. На рис. 4 приведено массовое распределение частиц по размерам для водного аэрозоля в начальный момент времени (кривая 1) и через 1 минуту при УЗ-воздействии для неиспаряемого (кривая 3) и испаряемого водного аэрозоля (кривая 2). Массовая

функция распределения по размерам $g(D)$ связана со счетной соотношением $g(D)=m/m_{10}f(D)$, где m_{10} – среднееарифметическая масса частиц:

$$m_{10} = \int_0^{\infty} mf(D)dD, \quad m - \text{масса частицы диаметра } D.$$

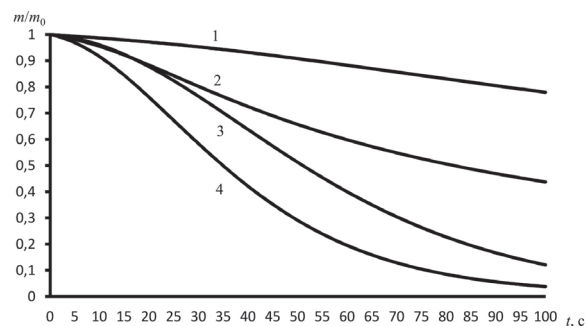


Рис. 3. Зависимость относительной массы аэрозоля от времени: 1) без испарения и без УЗ-воздействия; 2) без испарения, с УЗ-воздействием; 3) с испарением (вода), без УЗ-воздействия; 4) с испарением и с УЗ-воздействием

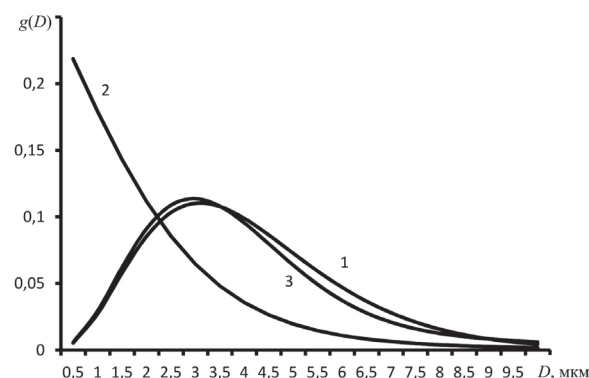


Рис. 4. Массовое распределение частиц по размерам при УЗ-воздействии: 1) начальный момент времени; 2) и 3) неиспаряемый аэрозоль через 1 мин

Спектр распределения неиспаряемого аэрозоля за этот промежуток времени практически не изменился; водяные капли из-за быстрого испарения сильно уменьшились в размерах, сместив максимум функции распределения в область $\sim 10^{-7}$ микрона. Качественный вид кривой 2, рис. 4, подтвержден в экспериментах по динамическим измерениям функции распределения субмикронных частиц водного аэрозоля [8]; количественное расхождение теоретических и экспериментальных результатов по средним диаметрам и концентрации частиц не превысило 20 %, что говорит об адекватности предлагаемой модели.

Выводы

На основе модели коагуляции аэрозоля под действием ультразвука в виде варианта интегрального уравнения Смолуховского, со стоком (испарение) и обрезанием спектра (осаждение), получе-

ны зависимости эффективности осаждения от частоты ультразвука. Показано, что для каждого характерного размера частиц аэрозоля существует оптимальная и минимальная частота акустического воздействия. Ультразвук с частотой ниже минимальной для аэрозоля с данным характерным размером частиц никак не влияет на скорость коагуляции и осаждения; повышение частоты ультразвука выше оптимальной не приводит к изменению эффективности осаждения.

С помощью численных расчетов получены зависимости относительной массы аэрозоля и массового распределения частиц по размерам от времени для испаряющихся, неиспаряющихся аэрозолей при ультразвуковом воздействии и без него. Испарение и ультразвуковое воздействие (с частотой, большей, чем минимальная для аэрозолей с данным размером частиц) оказывают существенное влияние на уменьшение концентрации частиц аэрозолей. Расчеты нашли качественное экспериментальное подтверждение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хмелев В.Н., Шалунова К.В., Цыганок С.Н., Барсуков Р.В., Сливин А.Н., Шалунов А.В. Ультразвуковая коагуляция аэрозолей. – Бийск: 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): Матер. VII Всеросс. научно-техн. конф. – Бийск, 6–7 октября 2010 г. – Бийск: Изд-во Алт. гос. техн. ун-та, 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. Кудряшова О.Б. Математическая модель эволюции жидкокапельных аэрозолей // Известия Томского политехнического университета. – 2012. – Т. 320. – № 2. – С. 129–133.
6. Розенберг Л.Д. Физические основы ультразвуковой технологии. – М.: Наука, 1970. – 689 с.
7. Денисов А.С., Подольский А.А., Турбаров В.И. Об увлечении аэрозольных частиц в звуковом поле при числах Рейнольдса ≤ 1 // Акустический журнал. – 1965. – Т. 11. – Вып. 1. – С. 146–155.
8. Титов С.С. Турбидиметрический высокоселективный метод и быстродействующий измерительный комплекс определения параметров нестационарных многофазных сред: дис. ... канд. техн. наук. – Бийск, 2011. – 153 с.

Поступила 10.04.2012 г.