

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ В СВОБОДНОЙ ОСЕСИММЕТРИЧНОЙ ТУРБУЛЕНТНОЙ СТРУЕ

А.К. Гильфанов<sup>1</sup>, Ш.Х. Зарипов<sup>1</sup>, В. Кох<sup>2</sup>

1 – Казанский (Приволжский) федеральный университет

2 – Институт токсикологии и экспериментальной медицины им. Д. Фраунхофера,  
г. Ганновер, Германия

artur.gilfanov@kpfu.ru

**Аннотация.** Развита математическая модель формирования аэрозольных наночастиц в свободной осесимметричной турбулентной струе в результате нуклеации, конденсации и коагуляции. Реализация модели основана на численном решении осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье–Стокса и применении метода моментов для решений уравнения аэрозольной динамики. Исследованы осредненные характеристики аэрозоля в зависимости от начальной скорости несущей среды. Выявлен вклад конденсации и коагуляции при различных значениях начальной скорости струи.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых МК-6235.2015.1 и гранта РФФИ № 15-01-06135.

### ВВЕДЕНИЕ

Свободная турбулентная струя – часто встречающееся явление в природных и технологических процессах. В аэрозольных реакторах частицы обычно синтезируются в условиях свободной турбулентной струи [2]. При этом в формирование частиц вовлечено множество процессов. Среди них можно выделить внутренние процессы: нуклеация и конденсация в результате пересыщения горячего насыщенного пара, попадающего в более холодную среду, броуновская коагуляция – столкновение и слипание частиц вследствие броуновского движения. А также внешние механизмы: конвективный перенос и турбулентная диффузия. Важная цель при использовании такой системы – обеспечить управляемый синтез аэрозольных частиц с прогнозируемым распределением частиц по размерам. Основными параметрами системы, влияющими на формируемое распределение, являются температура насыщения пара, выходная скорость парогазовой смеси и диаметр выходного отверстия. В настоящей работе проведено численное исследование формирования частиц диоктилсебацата (DEHS) в свободной осесимметричной турбулентной струе в зависимости от основных параметров системы.

### МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Динамика функции распределения частиц по размерам  $n(v,t)$  описывается общим уравнением динамики аэрозоля [1]

$$\frac{\partial \rho n}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{u} n) + \frac{\partial (Gn)}{\partial v} = \nabla \cdot (D \nabla n) + I(v^*) \delta(v - v^*) + \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v - v', v') n(v - v', t) n(v', t) dv' - n(v, t) \int_0^\infty \beta(v, v') n(v', t) dv' \quad (1)$$

где  $\rho$  и  $\bar{u}$  – плотность и скорость несущей среды соответственно,  $G$  – скорость изменения объема частиц вследствие конденсации,  $D$  – коэффициент диффузии частиц (сумма коэффициентов молекулярной и турбулентной диффузии),  $I$  – скорость появления частиц критического размера  $v^*$  вследствие нуклеации,  $\beta(v, v')$  – частота столкновения частиц объемов  $v$  и  $v'$  в результате броуновского движения. Последние два слагаемых описывают появление и исчезновения частиц в результате коагуляции.

Для учета фазового перехода рассматривается также уравнения переноса пара [6]

$$\frac{\partial \rho n_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{u} n_1) = \nabla \cdot (D \nabla n_1) - I(v^*) k^* \int_0^\infty \frac{G(v)}{v_1} n(v, t) dv \quad , \quad (2)$$

где  $n_1(t)$  – концентрация мономера конденсируемого пара, где  $v_1$  – объем мономера,  $k^*$  – число молекул пара в кластере критического размера  $v^*$  ( $k^* = v^*/v_1$ ).

Для решения уравнений (1), (2) применяется метод моментов. При умножении уравнения (1) на объем  $v^k$  и интегрировании по всевозможным объемам, задача сводится к решению уравнений для моментов распределения

$$\frac{\partial \rho M_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{u} M_k) = \nabla \cdot (D \nabla M_k) + \rho S_{M_k} \quad (3)$$

где  $S_{M_k}$  – источниковый член, учитывающий нуклеацию, конденсацию и коагуляцию. Для решения (3) используется подход, развитый в работах [4, 5]. В этом случае предполагается логарифмически нормальная функция распределения

$$n(v,t) = \frac{N}{3\sqrt{2v \ln \sigma_g}} \exp\left(-\frac{\ln^2(v/v_g)}{18 \ln^2 \sigma_g}\right) \quad (4)$$

где  $N$  – общая концентрация частиц,  $v_g$  – среднее геометрическое объема частиц,  $\sigma_g$  – стандартное геометрическое отклонение. Параметры и произвольный момент распределения могут быть выражены через первые три момента

$$v_g = \frac{M_1^2}{M_0^{1.5} M_2^{0.5}}, S_p = \frac{M_0 M_2}{M_1^2}, \ln^2 \sigma_g = \frac{1}{9} \ln S_p, M_k = M_0 \bar{v}^k S_p^{k^2/2-k/2}, \quad (5)$$

где  $S_p$  – индекс полидисперсности,  $\bar{v} = M_1/M_0$  – средний размер частиц. Таким образом, решаются уравнения (3) для первых трех моментов и уравнение переноса мономера (2). Для вычисления скорости нуклеации используется формула из [2]. Конденсация и коагуляция моделируются в рамках подхода, развитого в [4, 5].

Поле течения несущей среды предполагается неизотермическим вязким течением сжимаемого газа и описывается осредненными по Рейнольдсу уравнениями Навье–Стокса (RANS). В качестве модели турбулентности выбрана стандартная  $k$ - $\varepsilon$  модель. Влиянием турбулентности на перенос величин пренебрегается. Поле температуры описывается уравнением энергии в пренебрежении влияния диффузии пара. Все уравнения записываются в цилиндрических координатах  $(x, r)$  с учетом осевой симметрии течения. Замыкает систему уравнение состояния идеального газа.

## РЕЗУЛЬТАТЫ

Уравнения задачи решены численно в программе ANSYS/Fluent. Уравнения (2), (3) решены с использованием User-defined scalars (UDS), источниковые члены реализованы с помощью User-defined functions (UDF). Выбрана трапециевидальная расчетная область:  $600d$  – длина в осевом направлении,  $100d$  – высота входной границы,  $150d$  – высота выходной границы, где  $d=0.001$  м – диаметр выходного отверстия. Использовано структурированное сеточное разбиение:  $601 \times 301$  узлов в осевом и радиальном направлениях соответственно. Граничные условия выбраны в соответствии с параметрами экспериментов [3]. Температура насыщения пара  $T_0=185^\circ$  С, температура внешней среды  $T=23^\circ$  С. Взяты четыре значения выходной скорости:  $U_0=35, 53, 70$  и  $88$  м/с ( $Re=1944, 2944, 3889, 4889$ ).

Основными характеристиками аэрозоля, представляющими интерес, являются средний геометрический диаметр частиц  $d_g = (6v_g/\pi)^{1/3}$ , стандартное геометрическое отклонение распределения  $\sigma_g$  и счетный поток частиц, вычисляемый по формуле

$$\dot{N}(x) = 2\pi \int_0^\infty r v_x(x,r) N(x,r) dr. \quad (6)$$

Заметим, что изменение  $d_g$  и  $\sigma_g$  вдоль поперечного профиля незначительно. Таким образом, все характеристики независимы от радиальной координаты  $r$ . Динамика их изменения в зависимости от осевой координаты показана на рис. 1. Первичный рост частиц связан с эффектом конденсации и происходит на расстоянии около  $10d$  от выходного отверстия. Дальнейшее увеличение размера связано с коагуляцией и происходит с меньшей скоростью. Чем меньше выходная скорость, тем больший вклад явления конденсации в рост частиц, и тем больший получается их средний размер (45, 39, 35, 32 нм для  $U_0=35, 53, 70$  и  $88$  м/с соответственно), что обусловлено более длительным временем пребывания частицы в струе. С уменьшением  $U_0$  уменьшается и счетный поток в связи с меньшим массовым потоком частиц. Для всех значений выходной скорости аэрозоль получается полидисперсным ( $\sigma_g \approx 1.3$ ).

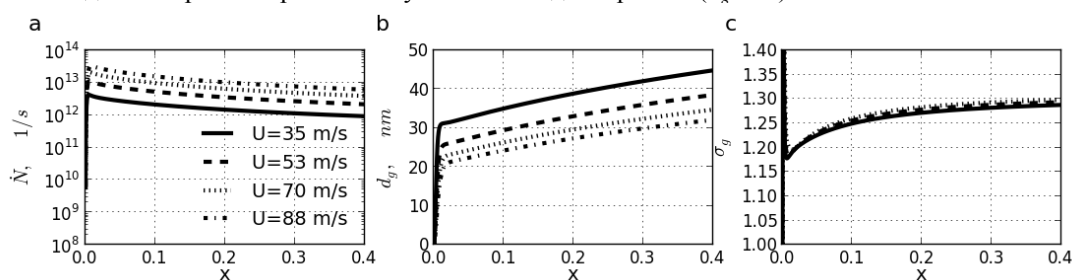


Рис. 1. Зависимость счетного потока (а), среднего геометрического диаметра (б) и стандартного геометрического отклонения (с) от осевой координаты

### Литература

1. Friedlander S.K. Smoke, dust, and haze. Fundamentals of aerosol dynamics. 2000. 432 p.

2. Girshick S.L., Chiu C.-P. // J. of Chemical Physics. 1990. V. 93 (2). P. 1273-1277.
3. Koch W., Lodding H., Pohlmann G. // J. of Aerosol Science. 2012. V. 49. P. 1-8.
4. Pratsinis S.E. // J. of Colloid and Interface Science. 1988. V. 124. P. 416-427.
5. Settumba, N., Garrick, S.C. // J. of Aerosol Science. 2003. V. 34. P. 149-167.
6. Upadhyay R.R., Ezekoye O.A. // J. of Aerosol Science. 2003. V. 34. P. 1665-1683.