

УДК 532.529.6

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСАЖДЕНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ АЭРОЗОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ ПРИ ОБТЕКАНИИ ПЕРИОДИЧЕСКОГО РЯДА ЦИЛИНДРОВ

Т.Ш. Зарипов

Аннотация

Теоретически изучена задача о движении электрически заряженных малых аэрозольных частиц при обтекании периодического ряда цилиндров. Поле скоростей ламинарного течения несжимаемого газа находится на основе численного решения стационарных уравнений Навье–Стокса методом конечных объемов в программе FLUENT. Уравнение переноса для заряженных частиц с учетом влияния электростатической силы решается совместно с уравнением для электрического потенциала в найденном поле скоростей несущей среды. Рассчитаны поля концентраций заряженных частиц и распределения электрического потенциала в области течения и эффективность осаждения дисперсной фазы в зависимости от числа Пекле и безразмерного параметра, характеризующего влияние электростатической силы.

Ключевые слова: фильтрация аэрозолей, заряженные частицы, эффективность осаждения.

Введение

Исследование воздушных дисперсных течений в пористых структурах представляет интерес для ряда природных и технологических процессов, в частности для описания процессов фильтрации аэрозолей [1–3] и движения запыленного воздуха в дыхательных путях человека [4]. Такое движение почти всегда сопровождается осаждением дисперсной фазы в результате воздействия на частицы различных сил, вклад которых определяется в первую очередь диапазоном размеров дисперсных включений. В области частиц малых размеров и малых скоростей течения ключевую роль в осаждении играет диффузионный механизм, обеспечивающий захват частиц в результате перемещения частиц в пористой среде за счет диффузии. Для дисперсных включений больших размеров и высоких скоростей осаждение частиц осуществляется в результате инерционного захвата. Для среднedisперсных аэрозолей (~ 0.1 – 1 мкм) вклад диффузионного и инерционного механизмов в осаждение становится незначительным, в этом случае частицы предварительно заряжают. Интенсификация процесса улавливания при этом обеспечивается действием электростатической силы [5–9].

В большинстве работ моделирование движения заряженных аэрозольных частиц сводится к учету в уравнениях движения индукционной электростатической силы. Такой подход вполне оправдан для малых концентраций и малых зарядов дисперсных включений. В общем случае модель движения заряженных аэрозольных частиц должна включать в себя, наряду с уравнениями течения несущей среды, уравнение переноса дисперсной фазы и уравнения электрического поля, создаваемого частицами [5, 10].

В настоящей работе в приближении электростатического поля и малости электрогазодинамического взаимодействия рассматривается задача об осаждении электрически заряженных частиц при обтекании периодического ряда цилиндров. Система уравнений поля течения газа, переноса частиц и электрического поля решается совместно. Получены распределения рассматриваемых полей в области течения и рассчитана эффективность осаждения дисперсной фазы.

1. Общая постановка задачи о движении заряженных аэрозольных частиц

Скорости течения газа внутри пористой структуры столь малы, что сжимаемостью газа можно пренебречь. Влиянием частиц на газовый поток пренебрегаем в силу малости их концентраций. Движение несущей среды в приближении ламинарного вязкого течения несжимаемого газа описывается стационарными уравнениями Навье – Стокса

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (1)$$

$$\rho \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} = -\nabla P + \mu \Delta \mathbf{U}, \quad (2)$$

где \mathbf{U} – вектор скорости газа, μ – коэффициент динамической вязкости, ρ – плотность воздуха, P – давление. При известном распределении концентрации $C(x, y)$ заряженных частиц в пространстве напряженность \mathbf{E} электрического поля выражается уравнением

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{qC}{\varepsilon_0}, \quad (3)$$

где q – величина заряда частицы, ε_0 – диэлектрическая проницаемость. Введя потенциал F электрического поля, $\mathbf{E} = -\nabla F$, перепишем (3) в форме

$$\Delta F = -\frac{qC}{\varepsilon_0}. \quad (4)$$

Поток заряженных аэрозольных частиц через единицу площади в результате конвективного переноса, диффузии и миграции по воздействию электростатической силы может быть представлен в виде

$$\mathbf{J} = -D\nabla C + \mathbf{U}C + qb\mathbf{E}C, \quad (5)$$

где $D = kTb$ – коэффициент диффузии, k – постоянная Больцмана, T – температура газа, $b = C_c/3\pi\mu d$ – коэффициент подвижности частицы, d – диаметр частицы, C_c – эмпирическая поправка Каннингема, учитывающая отклонение закона сопротивления от формулы Стокса при конечных числах Кнудсена Kn [12].

Уравнение неразрывности для потока частиц в стационарном случае записывается как

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = \mathbf{U} \cdot \nabla C - D\Delta C + qb\nabla \cdot (C\nabla F) = 0. \quad (6)$$

Перепишем уравнения (1),(2),(4),(6) в безразмерном виде

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (7)$$

$$\operatorname{Re}(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \Delta \mathbf{u}, \quad (8)$$

$$\mathbf{u} \cdot \nabla c - \operatorname{Pe}^{-1} \Delta c + \beta \nabla \cdot (c \nabla \varphi) = 0, \quad (9)$$

$$\Delta \varphi = -c, \quad (10)$$

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{U}}{U_0}, \quad p = \frac{PL_0}{\mu U_0}, \quad c = \frac{C}{C_0}, \quad \varphi = \frac{F\varepsilon_0}{qC_0L_0^2},$$

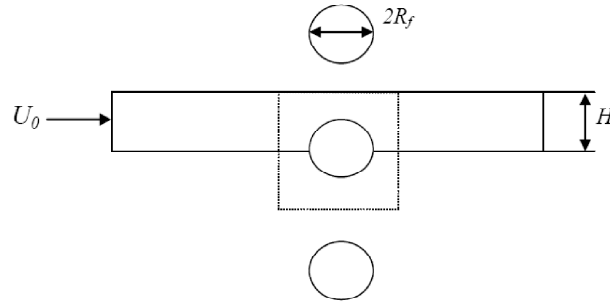


Рис. 1. Схема упаковки цилиндров

$$\text{Re} = \frac{\rho U_0 L_0}{\mu}, \quad \text{Pe} = \frac{L_0 U_0}{D}, \quad \beta = \frac{q^2 b C_0 L_0}{U_0 \varepsilon_0},$$

где L_0 и U_0 — масштабы длины и скорости, C_0 — начальная концентрация частиц. Инерционность течения несущей среды характеризуется числом Рейнольдса Re . Безразмерные параметры — число Пекле Pe и β — характеризуют влияние на процесс осаждения диффузии и электростатической силы соответственно.

Для численного решения уравнение (9) удобнее представить в форме

$$(\mathbf{u} - \nabla\varphi) \cdot \nabla c = \text{Pe}^{-1} \Delta c - \beta c^2. \quad (11)$$

Уравнения гидродинамики (7), (8) решаются независимо от уравнений переноса дисперсной фазы, после чего в известном поле скоростей несущей среды совместное решение уравнений (10), (11) дает самосогласованные распределения электрического потенциала и концентрации заряженных частиц.

2. Постановка задачи об обтекании периодического ряда цилиндров

Рассматривается двумерная задача о течении аэрозоля с электрически заряженными частицами с начальной скоростью U_0 в полосе высоты H периодического ряда цилиндров радиуса R_f (рис. 1). Одной из основных характеристик ряда цилиндров является плотность α , задаваемая формулой

$$\alpha = \frac{\pi}{4h^2}, \quad h = \frac{H}{R_f}. \quad (12)$$

Пористость ε ряда цилиндров выражается через плотность α по формуле $\varepsilon = 1 - \alpha$.

Для рассматриваемой задачи масштабами длины и скорости выступают радиус цилиндра R_f и скорость газа на входе U_0 . Граничные условия для гидродинамической задачи (7), (8) включают в себя: задание единичной безразмерной скорости на входе, условия симметрии на верхней и нижней границах полосы, равенство нулю избыточного давления на правой границе. В качестве граничных условий для задачи (10), (11) принимаются: равенство нулю потенциала электрического поля φ и концентраций частиц c на поверхности цилиндров $r = R_f$, условия симметрии на верхней и нижней границах $y = 0$, $y = h$ периодической полосы. Кроме того, на входе в полосу безразмерная концентрация частиц принимается равной единице, на выходе задаются мягкие граничные условия для концентрации. До и после ряда цилиндров на расстоянии $10R_f$ потенциал электрического поля принимается равным нулю, что соответствует наличию заземленной прозрачной для газа сетки.

Система уравнений движения газа (7), (8) с описанными граничными условиями решается методом конечных объемов в программе FLUENT [11]. Краевая задача

для уравнений (10), (11) численно решается в рассчитанном поле скоростей с помощью процедуры UDF (user-defined function) пакета FLUENT.

3. Результаты расчетов

На рис. 2–3 приведены результаты расчетов изоконцентраций c частиц и изолиний потенциала φ электрического поля для $\varepsilon = 0.99$, $Re = 0.034$, $\beta = 0.01$ и различных чисел Пекле. Отметим, что при значениях радиуса цилиндра $R_f = 50$ мкм и начальной скорости течения $U_0 = 0.01$ м/с диапазон изменения значений числа Пекле $Pe = 1.7 \div 1400$ соответствует изменению размера частиц в диапазоне $d = 0.003 \div 0.1$ мкм.

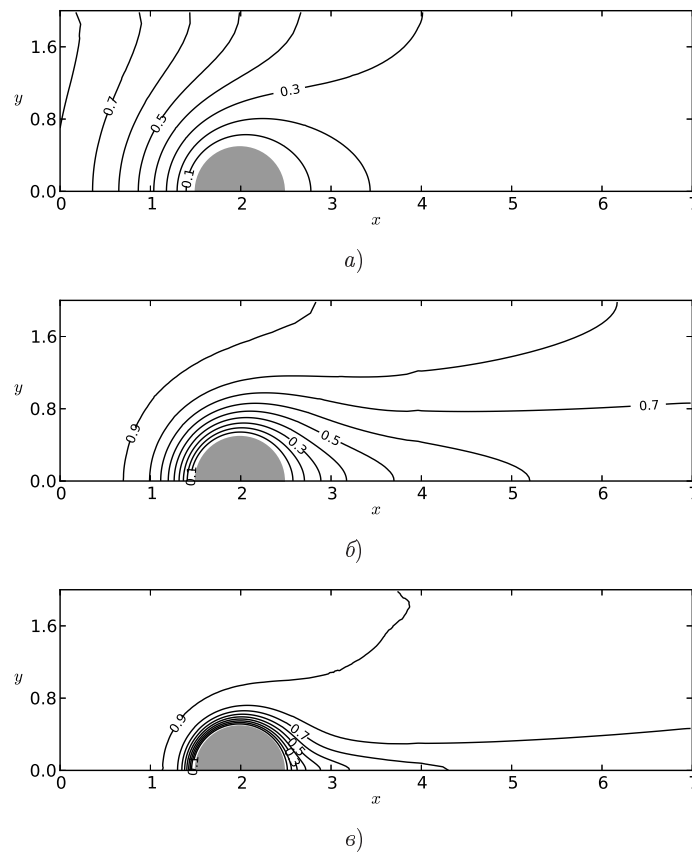


Рис. 2. Распределения концентрации частиц при различных числах Пекле Pe : 0.1 (а), 1 (б), 10 (в)

При малых числах Пекле интенсивное диффузионное оседание приводит к значительному снижению концентрации позади цилиндра с равномерным распределением её по высоте периодического элемента. С увеличением числа Пекле зона влияния диффузионного оседания уменьшается, и для $Pe = 10$ заметное падение концентрации частиц наблюдается лишь в окрестности цилиндра и тонком пограничном слое позади него.

Распределение потенциала электрического поля (рис. 3) обусловлено неоднородным пространственным распределением заряженных частиц. Существенная асимметрия распределения φ для $Pe = 0.1$ связана со значительным падением концентрации частиц в полосе за цилиндром.

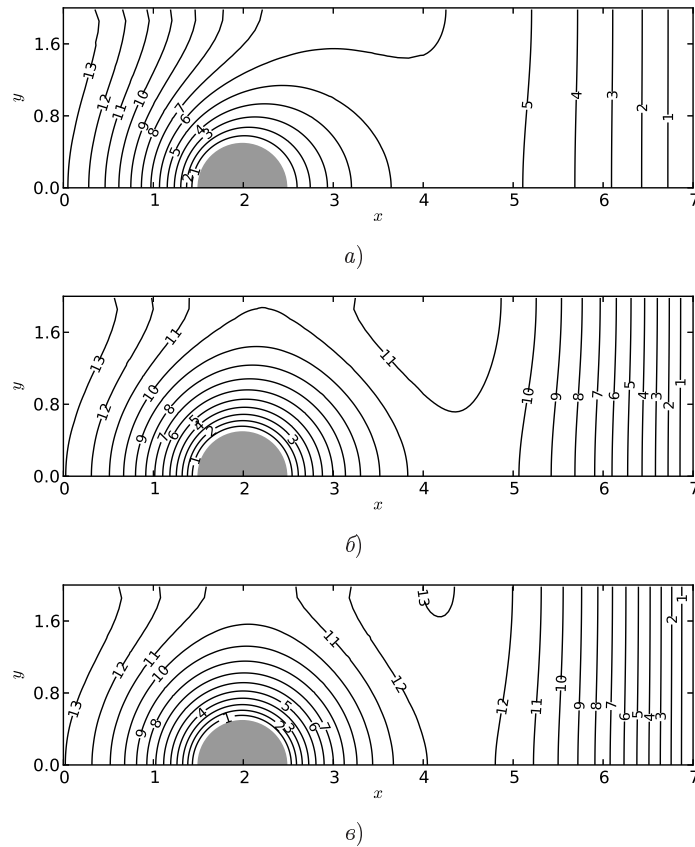


Рис. 3. Распределения изолиний потенциала электрического поля при различных числах Пекле Pe : 0.1 (а), 1 (б), 10 (в)

Основной целью моделирования движения аэрозольных частиц в пористой структуре является расчет эффективности осаждения частиц. Для рассматриваемой задачи эффективность осаждения характеризуется коэффициентом пропускания c_{out} , равным средней относительной концентрации частиц на выходе из периодической полосы.

На рис. 4 даны рассчитанные зависимости величин c_{out} от числа Пекле. С увеличением числа Пекле рост конвективного переноса приводит к уменьшению диффузионного осаждения частиц на цилиндрах. Для незаряженных частиц коэффициент пропускания c_{out} стремится к единице при больших числах Пекле. Для заряженных частиц даже в отсутствие диффузионного осаждения величина c_{out} будет меньше единицы во все диапазоне изменения величины Pe . Это связано с осаждением частиц под действием электростатической силы. Величина c_{out} в области больших чисел Pe определяется параметром β , то есть величиной заряда, подвижностью частиц и их начальной концентрацией.

Значение коэффициента захвата одиночного цилиндра η [2, 12] выражается через c_{out} по формуле

$$\eta = -h \ln(c_{out}). \quad (13)$$

Зависимости коэффициента η захвата отдельного цилиндра от числа Пекле приведены на рис. 5. В известной работе [13] на основе решения задачи о диффузионном осаждении аэрозольных частиц на стесненном цилиндре в рамках модели течения

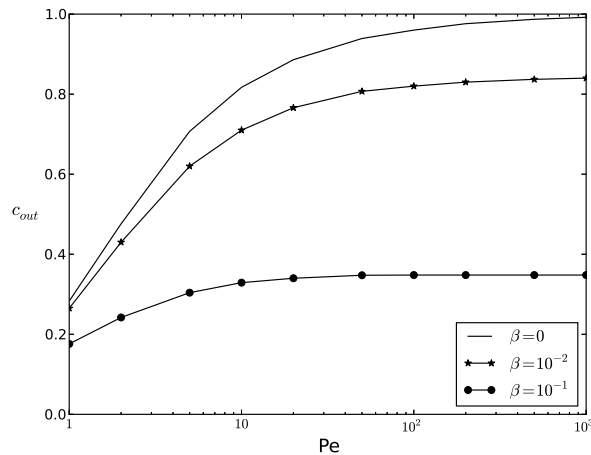


Рис. 4. Зависимость коэффициента пропуска от числа Пекле при различных значениях β

Кувабара была получена формула для эффективности диффузионного осаждения

$$\eta_D = 2.9\text{Ku}^{-1/3}\text{Pe}^{-2/3} + 0.624\text{Pe}^{-1}, \quad (14)$$

где гидродинамический фактор (параметр Кувабара) Ku определяется через плотность α упаковки по формуле [14]

$$\text{Ku} = -0.5 \ln \alpha - 0.75 + \alpha - 0.25\alpha^2. \quad (15)$$

Зависимость (14) на рис. 5 показана штриховой кривой. Расчеты в отсутствие заряда на частицах дают очень близкие кривые $\eta(\text{Pe})$. Некоторое расхождение в области малых чисел Пекле следует объяснить различием в принятых моделях течений несущей среды: аналитическая модель течения Кувабара в [13] и модель вязкого течения в приближении уравнений Навье–Стокса в настоящей работе. Для заряженных частиц кривые $\eta(\text{Pe})$ с ростом Pe стремятся к постоянным значениям, определяемым величиной β . Таким образом, выбор параметра β позволяет добиться высокой эффективности осаждения в отсутствие диффузионного механизма.

Величина заряда частицы находится как произведение числа n зарядов на значение единичного заряда $q = ne$ ($e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл). При данной напряженности электрического поля и размере частицы существует максимально возможный ее заряд [9]. Он достигается при равенстве напряженности внешнего поля поверхностной напряженности, необходимой для начала спонтанной эмиссии электронов. Для частиц размером более 0.1 мкм максимальный заряд может достигать нескольких сотен [9]. Оценим возможные значения параметра β для частиц с $d = 0.1$ мкм. При начальной концентрации частиц $C_0 = 10^{12} \text{ м}^{-3}$ [5] получим, что β принимает значения 0.00025 и 0.06 при $n = 10$ и $n = 50$ соответственно. При втором значении β влияние электростатического осаждения будет значительным. Приведенная оценка и результаты численных расчетов показывают, что даже при небольшом числе зарядов на аэрозольных частицах электростатическая сила заметно влияет на осаждение частиц.

Выводы

Решена задача о движении электрически заряженных малых аэрозольных частиц в периодической полосе упорядоченной упаковки цилиндров. Самогласован-

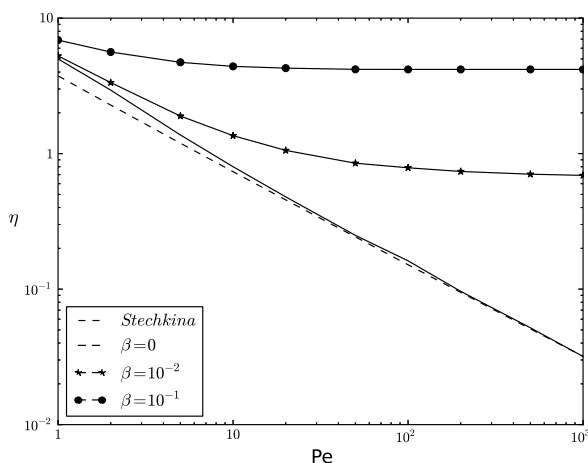


Рис. 5. Зависимость эффективности захвата одиночного цилиндра от Re при различных значениях β

ное решение системы уравнений течения газовой среды, уравнения переноса для заряженных частиц с учетом влияния электростатической силы и уравнения для электрического потенциала достигается в среде пакета FLUENT с использованием возможностей дополнительных модулей UDF. Рассчитана эффективность осаждения частиц при различных числах Пекле и значениях параметра, характеризующего влияние электростатической силы. Показано, что наличие даже небольшого числа зарядов на частицах приводит к заметному росту эффективности осаждения.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 12-01-00333-а, 12-07-00007-а).

Summary

T. Sh. Zaripov. Modeling of Deposition of Charged Aerosol Particles in a Flow through a Periodic Row of Cylinders.

The motion of charged aerosol particles in a flow through a periodic row of cylinders is theoretically studied. To obtain a velocity field of incompressible gas flow, a numerical solution of stationary Navier – Stokes equations is found by finite volume method using FLUENT code. The equation of transport of charged particles taking into account the electrostatic force is solved together with the equation for electric potential in the found gas velocity field. The particle concentration and electric potential distributions and the deposition efficiency are calculated.

Key words: aerosol filtration, charged particles, deposition efficiency.

Литература

1. *Brown R. C.* Air filtration: an integrated approach to the theory and applications of fibrous filters. – Pergamon Press, 1993. – 272 p.
2. *Курш А.А., Будыка А.К., Курш В.А.* Фильтрация аэрозолей волокнистыми материалами // Журн. Рос. хим. о-ва им. Д.И. Менделеева. – 2008. – Т. LII, № 5. – С. 97–102.
3. *Фукс Н.А.* Механика аэрозолей. – М.: Изд-во АН СССР, 1955. – 347 с.

4. *Finlay W.H.* The mechanics of inhaled pharmaceutical aerosols: an introduction. – Acad. Press, 2001. – 320 p.
5. *Alonso M., Alguacil F.J.* Penetration of aerosol undergoing combined electrostatic dispersion and diffusion in a cylindrical tube // *J. Aerosol Sci.* – 2007. – V. 38, No 5. – P. 481–493.
6. *Alonso M., Alguacil F.J., Santos J.P., Jidenko N., Borra J.P.* Deposition of ultrafine aerosol particles on wire screens by simultaneous diffusion and image force // *J. Aerosol Sci.* – 2007. – V. 38, No 12. – P. 1230–1239.
7. *Yu C.P., Chandra K.* Deposition of charged particles from laminar flow in rectangular and cylindrical channels by image force // *J. Aerosol Sci.* – 1978. – V. 9, No 2. – P. 175–180.
8. *Фисенко С.П.* Броуновское движение и дрейф заряженных наночастиц в ламинарном потоке в плоском канале // *Инж.-физ. журн.* – 2009. – Т. 82, № 2. – С. 215–220.
9. *Райст П.* Аэрозоли. Введение в теорию. – М.: Мир, 1987. – 280 с.
10. *Ватажин А.Б., Улыбышев К.Е.* Дозвуковое обтекание сферического зонда потоком электрически квазинейтрального слабоионизованного газа // *Механика жидкости и газа.* – 2006. – № 1. – С. 68–75.
11. *www.ansys.com*
12. *Hinds W.C.* Aerosol technology: properties, behavior, and measurement of airborne particles. – N. Y.: Wiley, 1999. – 464 p.
13. *Стечкина И.Б.* Диффузионное осаждение аэрозолей в волокнистых фильтрах // *Докл. АН СССР.* – 1966. – Т. 167, № 6. – С. 1327–1330.
14. *Kuwabara S.* The forces experienced by randomly distributed parallel circular cylinders or spheres in a viscous flow at small Reynolds numbers // *J. Phys. Soc. Japan.* – 1959. – V. 14, No 4. – P. 527–532.

Поступила в редакцию
20.01.12

Зарипов Тимур Шамилевич – младший научный сотрудник НИЦ «НИИММ им. Н.Г. Чеботарева» Казанского (Приволжского) федерального университета.

E-mail: *zaript@gmail.com*