

УДК:536.4: 536.7

Процесс образования дисперсного композитного материала при коагуляции дисперсных фракций в потоках газозвесей

А.Л. Тукмаков

*Институт механики и машиностроения
ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань*

E-mail: tukmakov@imm.knc.ru

Описана эволюция дисперсности порошково-капельной газозвеси в потоке со скоростным скольжением фракций. Процесс описывается эйлеровой моделью полидисперсной газозвеси, состоящей из нескольких фракций металлических частиц и из фракции капель полимера с воздухом в качестве несущей среды. Для моделирования движения несущей среды применяется система уравнений вязкого сжимаемого теплопроводного газа, в которой учитывается обмен импульсом и энергией с дисперсными фракциями. Динамика каждой дисперсной фракции описывается системой уравнений газодинамического типа с учетом межфазного обмена импульсом и энергией с несущей средой. Система уравнений полидисперсной газозвеси представляется в обобщенных криволинейных координатах и решается явным методом «предиктор-корректор» с расщеплением пространственного оператора по направлениям и со схемой нелинейной коррекции на каждом временном шаге. Для описания процесса коагуляции металлических фракций и фракции полимера применяется модель Смолуховского, учитывающая парные соударения частиц и позволяющая скорректировать значения массы, радиуса, температуры, скорости и средней плотности фракций на каждом временном шаге выполнения основного алгоритма. Рассмотрены временные и пространственные характеристики процесса коагуляции металлических частиц и капель полимера в потоке со скоростным скольжением фракций.

Ключевые слова: двухфракционная газозвесь, уравнения Навье–Стокса, явная схема Мак-Кормака, коагуляция, композиционный материал.

Введение

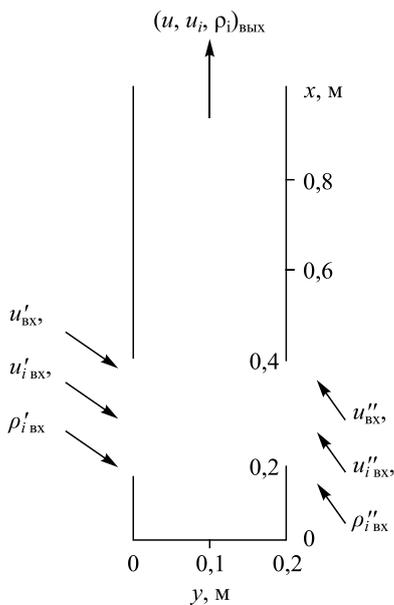
Для придания изделиям из термопластичных полимеров заданных свойств используются различные наполнители, такие как дисульфид молибдена, кобальт, стекло, бронза, уголь, графит, кокс. Эти добавки позволяют повысить износостойкость, твердость и поверхностную прочность материала, снизить коэффициенты трения и термического расширения, повысить теплопроводность [1]. Предназначенные для напыления на поверхность порошковые композиционные материалы представляют собой интегрированные комплексы, каждая частица которых содержит как полимерную матрицу, так и частицы наполнителя [2]. Частица с интегрированными свойствами может быть получена путем объединения исходных компонентов в более крупную частицу в процессе коагуляции мелкодисперсных частиц наполнителя и капель термопластичного полимера

при смешении дисперсных потоков капель полимера и частиц наполнителя с последующей полимеризацией материала полимерной матрицы [2]. Полученный композитный материал может напыляться на защищаемую поверхность для придания ей требуемых свойств.

При разработке численных моделей и описании динамики дисперсных фракций используются как лагранжевы, так и эйлеровы методы [3, 4]. Преимуществом лагранжева подхода для расчета полей скорости и плотности дисперсной фазы при эйлеровом моделировании динамики несущей среды является возможность находить зависимые параметры вдоль траекторий частиц из решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений, учитывать пересечения траекторий частиц [3]. В то же время единый континуальный подход при описании динамики фаз позволяет унифицировать вычислительный алгоритм. Так, в работе [4] приводится сопоставление результатов применения эйлерова и лагранжева описаний динамики дисперсной фазы при численном моделировании распространения дисперсной примеси за внезапным расширением трубы. Несущая среда в обоих случаях описывается системой 3D RANS-уравнений с учетом межфазного обмена и с моделью переноса рейнольдсовых напряжений, учитывающей влияние дисперсной фазы на турбулентность. На основе сопоставления решений делается вывод об эквивалентности результатов расчетов по обоим моделям для капель диаметром до 30 мкм и об отличии в среднем на 15 % для капель диаметром порядка 100 мкм.

В приводимых ниже расчетах используется эйлерова модель как для несущей, так и для дисперсной фазы. При описании коагуляции частиц применяется градиентный механизм [5–7], который описывается лагранжевой моделью Смолуховского для парных соударений [5], реализующийся при движении фракций с относительным скоростным скольжением. Влияние турбулентных пульсаций несущей среды и броуновского движения не учитывается.

Рассмотрим модель и результаты расчетов течения коагулирующей смеси, состоящей из нескольких фракций металлопорошка и из капель полимера, движущихся в потоке со скоростным скольжением фракций (рис. 1). Пусть расчетная область представляет собой плоский канал, ограниченный снизу твердой стенкой и открытый сверху. Через прорезы в левой и правой боковых стенках канала подаются дисперсные потоки различного состава. Газовзвесь, подаваемая слева содержит фракции металлопорошка, тогда как справа подается поток с каплями полимера. На выходе в результате коагуляции капель полимера и частиц порошка, образуется газовзвесь, содержащая наряду с исходными фракциями фракцию композита, состав частиц которого зависит от размеров, скорости и концентрации частиц в дисперсных потоках.



Газовзвесь, подаваемая слева содержит фракции металлопорошка, тогда как справа подается поток с каплями полимера. На выходе в результате коагуляции капель полимера и частиц порошка, образуется газовзвесь, содержащая наряду с исходными фракциями фракцию композита, состав частиц которого зависит от размеров, скорости и концентрации частиц в дисперсных потоках.

Уравнения движения несущей среды и дисперсной фазы

Предполагается, что газовзвесь состоит из воздуха, нескольких дисперсных фракций металлического порошка и дисперсной фракции капель полимера. Динамика такой смеси может быть описана системой уравнений полидисперсной газовзвеси с учетом механизма коагуляции фракций [5, 8, 9].

Рис. 1. Схема расчетной области.

Система уравнений включает в себя уравнения движения несущей среды и дисперсной фазы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p - \tau_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho u v - \tau_{xy}) &= - \sum_{i=1,n} F_{xi} + \alpha \frac{\partial p}{\partial x}, \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u v - \tau_{xy}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2 + p - \tau_{yy}) &= - \sum_{i=1,n} F_{yi} + \alpha \frac{\partial p}{\partial y}, \\ \frac{\partial(e)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left((e + p - \tau_{xx})u - \tau_{xy}v + \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((e + p - \tau_{yy})v - \tau_{xy}u + \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) &= \\ &= - \sum_{i=1,n} Q_i - \sum_{i=1,n} (|F_{xi}|(u - u_i) - |F_{yi}|(v - v_i)) + \alpha \left(\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} \right), \\ p &= (\gamma - 1)(e - \rho(u^2 + v^2)/2), \quad e = \rho I + \rho(u^2 + v^2)/2, \quad \alpha = \sum_{i=1,n} \alpha_i, \\ \tau_{xx} &= \mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} D \right), \quad \tau_{yy} = \mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} D \right), \quad \tau_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad D = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}, \end{aligned} \quad (1)$$

здесь ρ , u , v , u_i , v_i , e , λ , μ , γ — соответственно плотность, составляющие скорости несущей и дисперсной фаз, полная энергия, коэффициенты теплопроводности и вязкости несущей фазы, постоянная адиабаты; $I = RT/(\gamma - 1)$ — удельная внутренняя энергия газа. Силы взаимодействия несущей среды i -ой дисперсной фракции F_{xi} , F_{yi} , а также тепловой поток между несущей средой и i -ой дисперсной фракцией Q_i определяются законами межфазного трения и теплообмена.

Динамика каждой компоненты дисперсной фазы описывается уравнением сохранения средней плотности дисперсной фазы, уравнениями сохранения компонент импульса и уравнением сохранения тепловой энергии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i u_i)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_i v_i)}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho_i u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_i u_i^2) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_i u_i v_i) &= F_{xi} - \alpha \frac{\partial p}{\partial x}, \\ \frac{\partial(\rho_i v_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_i u_i v_i) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_i v_i^2) &= F_{yi} - \alpha \frac{\partial p}{\partial y}, \\ \frac{\partial(e_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(e_i u_i) + \frac{\partial}{\partial y}(e_i v_i) &= \text{Nu}_i \frac{6\alpha_i}{(2r_i)^2} \lambda (T - T_i), \\ \rho_i &= \alpha_i \rho_{i0}, \quad e_i = \rho_i C_{pi} T_i, \quad \alpha = \sum_{i=1,n} \alpha_i, \end{aligned} \quad (2)$$

здесь α_i , ρ_i , e_i , T_i — объемное содержание, средняя плотность, внутренняя энергия и температура дисперсной фазы соответственно, C_{pi} , ρ_{i0} — удельная массовая теплоемкость и плотность вещества твердой фазы i -ой фракции. Составляющие силы трения F_x и F_y определяются следующим образом [8]:

$$F_{xi} = \frac{3}{4} \frac{\alpha_i}{(2r_i)} C_d \rho \sqrt{(u-u_i)^2 + (v-v_i)^2} (u-u_i),$$

$$F_{yi} = \frac{3}{4} \frac{\alpha_i}{(2r_i)} C_d \rho \sqrt{(u-u_i)^2 + (v-v_i)^2} (v-v_i),$$

$$C_{di} = C_{di}^0 \psi(M_{i0}), \quad C_{di}^0 = \frac{24}{\text{Re}_{i0}} + \frac{4}{\text{Re}_{i0}^{0,5}} + 0,4, \quad \psi(M_{i0}) = 1 + \exp\left(-\frac{0,427}{M_{i0}^{0,63}}\right),$$

$$\text{Re}_{i0} = \rho |\bar{V} - \bar{V}_i| 2r_i / \mu, \quad M_{i0} = |\bar{V} - \bar{V}_i| / c,$$

$$\text{Nu}_i = 2 \exp(-M_{i0}) + 0,459 \text{Re}_{i0}^{0,55} \text{Pr}^{0,33}, \quad \text{Pr} = \gamma C_p \mu / \lambda, \quad 0 \leq M_{i0} \leq 2, \quad 0 \leq \text{Re}_{i0} < 2 \cdot 10^5.$$

Температура несущей среды находится из соотношения $T = (\gamma - 1)(e/\rho - 0,5(u^2 + v^2))/R$. Тепловая энергия движущейся в газе i -ой фракции твердой фазы определяется как $e_i = \rho_i C_{pi} T_i$. В уравнение энергии для несущей фазы входит тепловой поток за счет теплообмена между газом и частицей: $Q_i = \alpha^T 4\pi r_i^2 (T - T_i) n = 6\alpha_i \text{Nu}_i \lambda (T - T_i)/(2r_i)^2$, где $\text{Nu}_i = 2r_i \alpha^T / \lambda$ — число Нуссельта, n — концентрация частиц, r_i — радиусы частиц i -ой фракции, T, T_i — температуры газа и фракции, α_i — коэффициент объемного содержания i -ой фракции, α^T — коэффициент теплообмена на границе капля-газ, λ — коэффициент теплопроводности газа.

Модель коагуляции частиц

Дисперсная фаза состоит из порошковых фракций, образованных твердыми сферическими частицами заданного размера, и из фракции, состоящей из капель полимера. При коагуляции частиц порошковых фракций с каплями полимера происходит уменьшение концентрации и средней плотности порошковых фракций при неизменных размерах их частиц, а также изменение размера, массы капель, средней плотности, температуры и скорости полимерной фракции за счет присоединения к ней твердых частиц. При этом концентрация полимерной фракции за счет коагуляции не меняется. Изменение массы, импульса и температуры частиц полимерной фракции, а также изменение вследствие коагуляции концентрации частиц порошковых фракций могут быть описаны с помощью лагранжевой модели Смолуховского [5], которая будет приведена ниже.

Масса m_i и объем V_i частицы i -ой фракции — акцептора, движущейся со скоростью (u_i, v_i) , возрастают за счет поглощения более мелких частиц j -ых фракций-доноров

$$\text{с массой } m_j, \text{ объемом } V_j \text{ и скоростью } (u_j, v_j): \quad \frac{dm_i}{d\tau} = \sum_{j=1}^{i-1} k_{ij} n_j m_j, \quad \frac{dV_i}{d\tau} = \sum_{j=1}^{i-1} k_{ij} n_j V_j,$$

где $k_{ij} = \frac{\pi}{4} (d_i + d_j)^2 \sqrt{(u_j - u_i)^2 + (v_j - v_i)^2}$ — константа коагуляции, d_j — диаметры частиц порошковых фракций ($j = 1, \dots, i-1$), d_i — диаметры частиц полимерной фракции ($i = j$). При записи константы k_{ij} предполагается, что каждое столкновение частиц оканчивается их коагуляцией. Также предполагается, что при объединении твердых частиц и капель жидкого полимера форма новой частицы остается сферической, а также допускается, что дробления капли-акцептора при соударении с частицами-донорами не происходит. Новое значение объема частиц i -ой фракции-акцептора в текущем узле конечно-разностной сетки в предположении о сохранении сферической формы позволяет определить новое значение радиуса частицы r_i . Уменьшение концентрации j -ых частиц порошковых фракций вследствие поглощения их каплями полимерной i -ой фракции описывается

уравнением $dn_j/d\tau = -n_j k_{ij} n_i$, ($j = 1, 2, \dots, i-1$). Новое значение объемного содержания j -ой фракции при концентрации, изменившейся вследствие коагуляции, определяется как $\alpha_j = 4/3 \pi r_j^3 n_j$. Концентрация n_j определяется через среднюю плотность и радиус j -ой фракции на каждом шаге вычислений. Слияние мелких частиц порошковых фракций с каплями полимерной фракции приводит к изменению составляющих скорости капель:

$$\frac{du_i}{d\tau} = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{i-1} k_{ij} (u_j - u_i) m_j n_j, \quad \frac{dv_i}{d\tau} = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{i-1} k_{ij} (v_j - v_i) m_j n_j.$$

Температура частицы фракции-акцептора после коагуляции с частицами фракции-донора может быть найдена из соотношения $T = \frac{1}{Cm} \left(\sum_{j=1}^{i-1} k_{ij} n_j C_{pj} m_j T_j + C_{pi} m_i T \right)_i$, где T —

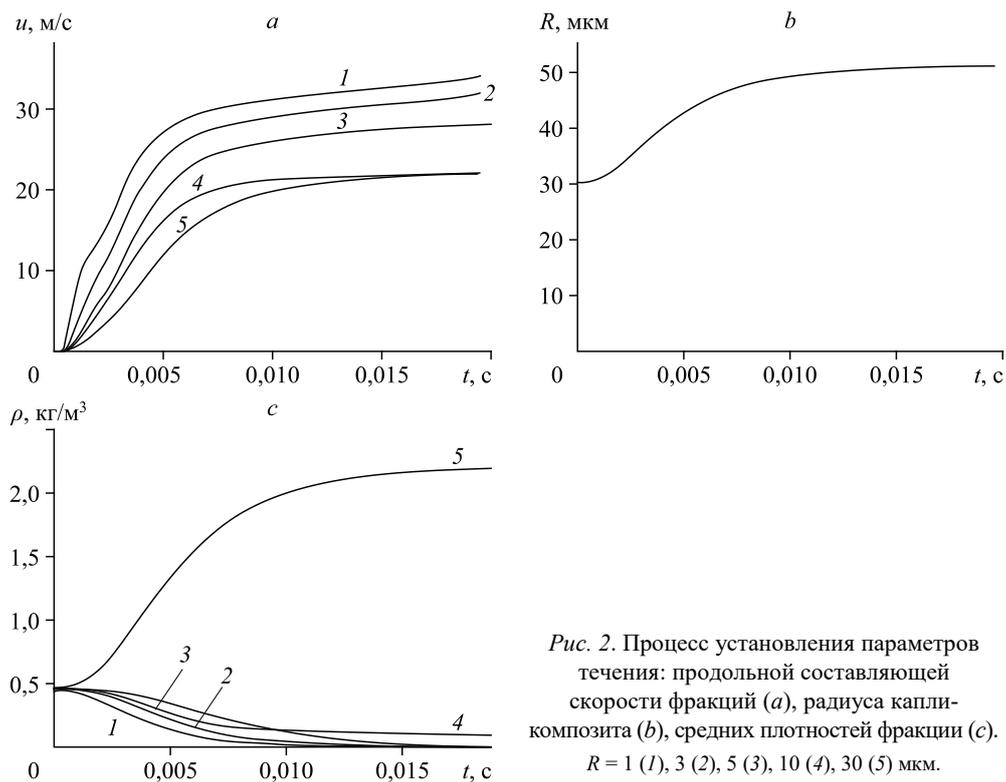
температура, $C = \frac{1}{m} \left(\sum_{j=1}^{i-1} k_{ij} n_j C_{pj} m_j + C_{pi} m_i \right)$ — удельная массовая теплоемкость, m —

масса частицы i -ой фракции-акцептора после коагуляции; T_i, C_{pi}, m_i — те же параметры частицы-акцептора до коагуляции, T_j, C_{pj}, m_j — параметры частиц j -ых фракций-доноров. Связанные с коагуляцией изменения параметров дисперсности фракций учитывались после выполнения каждого временного шага основного алгоритма.

Полная система уравнений, включающая в себя системы (1) и (2), записывалась в обобщенных криволинейных координатах [9–11] с расщеплением пространственного оператора по направлениям [12], со схемой нелинейной коррекции [13] и решалась явным методом Мак-Кормака [9, 11].

Постановка задачи и результаты расчетов

Схема расчетной области, представляющей собой плоский канал, приведена на рис. 1. В начальный момент времени внутри расчетной области задавалась неподвижная смесь воздуха, четырех фракций металлопорошка и фракции капель полимера. Начальная температура T несущей среды и фракций равнялась 293 К при плотности воздуха $\rho_0 = 1,29$ кг/м³. Объемные содержания и радиусы частиц порошковых фракций составляли: $\alpha_i = 5 \cdot 10^{-5}$ ($i = 1-4$), $R_1 = 1$ мкм, $R_2 = 3$ мкм, $R_3 = 5$ мкм, $R_4 = 10$ мкм при плотности вещества $\rho_{0i} = 8800$ кг/м³. Таким образом, начальная средняя плотность порошковых фракций $\rho_i = 0,44$ кг/м³. Полимерная фракция с начальным объемным содержанием $\alpha_5 = 5 \cdot 10^{-4}$ состояла из капель стирола радиусом 30 мкм с физической плотностью $\rho_{05} = 906$ кг/м³ и начальной средней плотностью $\rho_5 = 0,453$ кг/м³. На боковых стенках канала при $0,2 \text{ м} < x < 0,4 \text{ м}$ задаются входные потоки несущей среды и дисперсных фракций: при $y = 0$ задается входной поток смеси воздуха с каплями полимера. При температуре воздуха $T = 293$ К, газовой постоянной $R = 278$ Дж/(кг·К) и постоянной адиабаты $\gamma = 1,4$ скорость звука $c = (\gamma RT)^{1/2} = 337$ м/с. В приведенных ниже расчетах при $y = 0$ составляющие скорости несущей среды и дисперсных фракций вдоль осей x и y принимали значения $u = -17$ м/с, $v = 17$ м/с, средняя плотность порошковых фракций $\rho_i = 0,88$ кг/м³ ($i = 1-4$), средняя плотность полимерной фракции $\rho_5 = 0,004$ кг/м³, температура несущей и дисперсной фазы $T = 293$ К. На входной границе при $y = 0,2$ м средняя плотность порошковых фракций $\rho_i = 0,0088$ кг/м³ ($i = 1-4$), средняя плотность полимерной фракции $\rho_5 = 0,906$ кг/м³, температура несущей и дисперсной фаз $T = 293$ К, составляющие скорости несущей среды и фракций составляли $u = 10$ м/с, $v = -10$ м/с. На твердых поверхностях для скорости несущей среды задавались условия прилипания, для скорости фракций — условие проскальзывания, а на выходной границе



при $x = L$ для составляющих скорости несущей и дисперсной фаз ставились однородные граничные условия Неймана. Стационарное решение находилось методом установления.

На рис. 2а–2с приведены временные зависимости продольной составляющей скорости, радиуса капель полимера и средних плотностей фракций в точке с координатами ($x = L/2, y = h/2$). При $t > 0,015$ с скорости дисперсных фракций приближаются к стационарным значениям (рис. 2а). Относительные числа Рейнольдса для неравновесных по скорости металлических фракций и композита в стационарном режиме составляют: $Re_{02} \approx 1, Re_{03} \approx 4, Re_{04} \approx 13, Re_{05} \approx 60$.

При $t > 0$ вследствие коагуляции происходит быстрый рост эффективного радиуса капли полимера от $R = 30$ мкм в начальный момент времени до $R \approx 50$ мкм (рис. 2b). Рост средней плотности полимерной фракции сопровождается уменьшением в потоке средних плотностей фракций металлопорошка (рис. 2с).

На рис. 3 приводится поле скоростей газа в стационарном режиме. Вблизи закрытого конца канала ($x = 0$) формируется зона разворота потока, где достигается наибольшая скоростная неравновесность и интенсивная коагуляция порошковых и полимерной фракций.

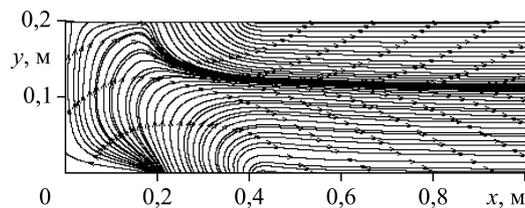


Рис. 3. Поле скоростей газа в расчетной области.

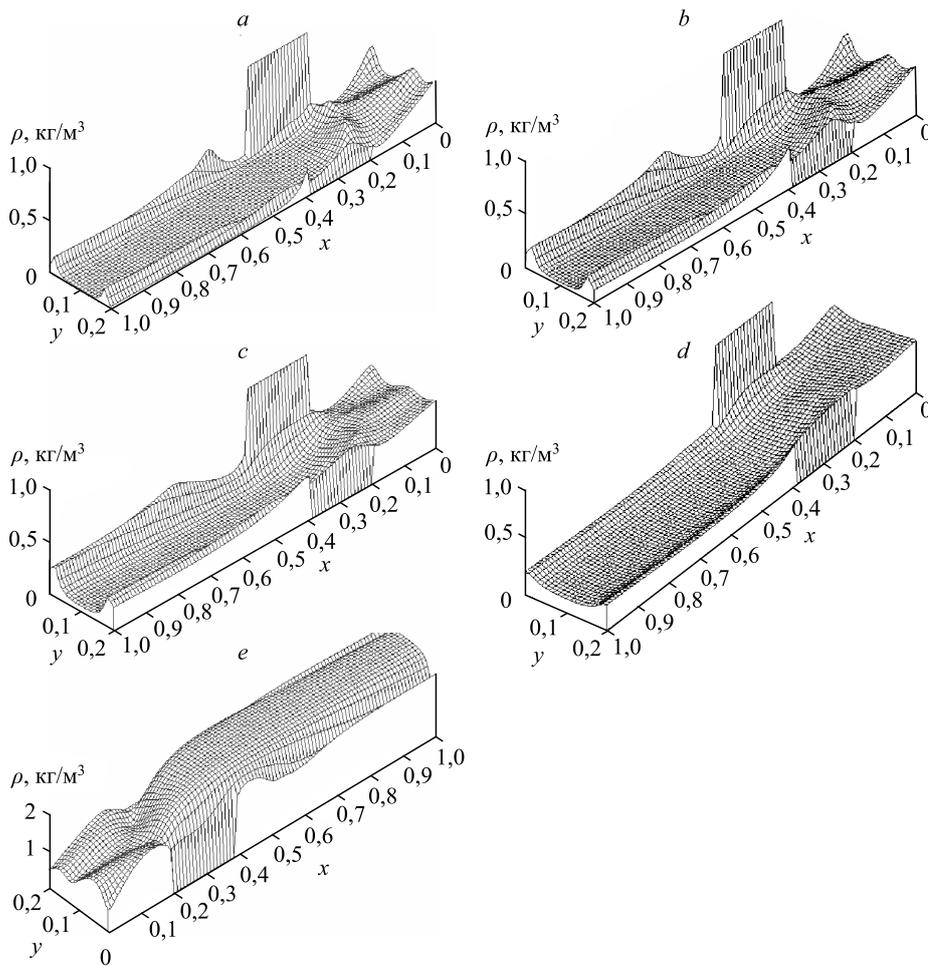


Рис. 4. Пространственные распределения средней плотности фракций в стационарном режиме.

$R = 1$ (a), 3 (b), 5 (c), 10 (d), 30 (e) мкм.

Пространственные распределения средних плотностей порошковых и полимерной фракции показаны на рис. 4. На выходе расчетной области при $x = 1$ м в стационарном режиме наблюдается малое содержание металлопорошковых фракций (рис. 4a–4d) и высокая средняя плотность полимерной фракции (рис. 4e). Стационарное значение средней плотности металло-полимерной фракции достигается при $x \approx 0,4$ м (рис. 4e).

На рис. 5 показано пространственное распределение эффективных радиусов капель полимера, содержащих частицы металлопорошка. При $x > 0,4$ м при выбранных параметрах течения, составе и дисперсности фракций в канале формируется стационарный поток с равномерным распределением эффективного радиуса и средней плотности металлополимерной фракции.

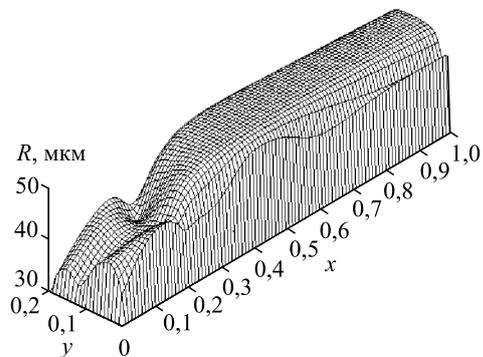


Рис. 5. Пространственное распределение величины радиуса капель композита.

Заключение

Построена модель течения металлополимерной газозвеси с полидисперсной структурой твердых порошковых фракций, коагулирующих с каплями полимерной фракции. Расчеты позволили описать процесс изменения дисперсности смеси, рост средней плотности и радиуса металлополимерных капель и снижение средней плотности твердых порошковых фракций. Получены оценки для времени и пространственного масштаба, на которых достигается стационарный режим течения и происходит процесс установления дисперсности смеси.

Список литературы

1. **Бондалетова Л.И., Бондалетов В.Г.** Полимерные композиционные материалы: учеб. пособие. Ч. 1. Томск: Изд-во Томского политехн. ун-та, 2013. 118 с.
2. **Богомолова О.Ю., Данилаев М.П.** Параметры течения многофазных газовых потоков в задаче капсулирования субмикронных частиц полимером // Научно-техн. вестник Поволжья. 2016. № 3. С. 25–27.
3. **Осипцов А.Н.** Лагранжев подход в механике дисперсных сред: преимущества и перспективы // Вестн. Нижегородского ун-та им. Н.И. Лобачевского. 2011. № 4 (3). С. 1024–1026.
4. **Пахомов М.А., Терехов В.И.** Распространение твердых частиц в газодисперсном ограниченном закрученном потоке. Эйлерово и Лагранжево описание // Теплофизика и аэромеханика. 2017. Т. 24, № 3. С. 335–348.
5. **Алемасов В.Е., Дрегалин А.Ф., Тишин А.П., Худяков В.А.** Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Справочник в пяти томах. Т. 1. Методы расчета. М.: Производственно-издательский комбинат ВИНТИ, 1971. 267 с.
6. **Зайчик Л.И., Алипченков В.М.** Коагуляция аэрозольных частиц в турбулентном потоке // Теплофизика высоких температур. 2008. Т. 46. С. 730–739.
7. **Шрайбер А.А., Милютин В.Н., Яценко В.П.** Гидромеханика двухкомпонентных потоков с твердым полидисперсным. Киев : Наукова думка, 1980. 252 с.
8. **Кутушев А.Г.** Математическое моделирование волновых процессов в аэродисперсных и порошкообразных средах. С.-П.: Изд-во Недр, 2003. 283 с.
9. **Тукмаков А.Л., Гонконог В.Г., Тукмакова Н.А.** Гидро- и термодинамика полидисперсной парок капельной смеси в канале регазификатора-подогревателя сжиженного природного газа // Теплофизика и аэромеханика. 2020. Т. 27, № 2. С. 281–296.
10. **Steger J.L.** Implicit finite-difference simulation of flow about arbitrary two-dimensional geometries // AIAA J. 1978. Vol. 16, No. 7. P. 679–686.
11. **Флетчер К.** Вычислительные методы в динамике жидкостей. Т. 2. М.: Мир, 1991. 551 с.
12. **Ковеня В.М., Тарнавский Г.А., Черный С.Г.** Применение метода расщепления в задачах аэродинамики. Новосибирск: Наука, 1990. 242 с.
13. **Музафаров И.Ф., Утюжников С.В.** Применение компактных разностных схем к исследованию нестационарных течений сжимаемого газа // Математическое моделирование. 1993. Т. 5, № 3. С. 74–83.

*Статья поступила в редакцию 27 июля 2020 г.,
после доработки — 11 февраля 2021 г.,
принята к публикации 23 марта 2021 г.*