

УДК 615.453.28

DOI: 10.15372/PMTF202315407

ДИНАМИКА ОБЛАКА ДЕЗАКТИВИРУЮЩЕГО АЭРОЗОЛЯ ПРИ ИМПУЛЬСНОЙ ГЕНЕРАЦИИ

О. И. Гаенко, И. Е. Конюхов, Е. В. Муравлев, О. Б. Кудряшова,
С. С. Титов, В. А. Клименко

Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН, Бийск, Россия

E-mails: yuu-95@mail.ru, ilyakon008@gmail.com, evvimv@gmail.com,

olgakudr@inbox.ru, titov@ipcet.ru, klimenko@siberia.design.ru

Исследуются процессы распыления, распространения в пространстве и осаждения частиц аэрозоля, сгенерированного импульсным способом с использованием энергии высокоэнергетических материалов. Такие аэрозоли создаются с целью дезактивации вредных газовых или аэрозольных образований. Предложено математическое описание эволюции дезактивирующего аэрозольного облака, приведены результаты экспериментов по распылению аэрозоля из частиц оксида титана.

Ключевые слова: импульсное распыление, дезактивирующий аэрозоль, энергия высокоэнергетических материалов, математическое моделирование, диоксид титана

Введение. В связи с возрастающей опасностью экологических угроз, технологических выбросов, террористических атак с применением вредных и опасных веществ возникает проблема дезактивации таких веществ в воздухе и на поверхностях в помещениях. Другой современной проблемой является предотвращение распространения биологических аэрозолей, несущих опасные вирусы и микробы, возникшие естественным путем или в результате применения биологического оружия. Один из способов решения данной проблемы — распыление специальных дезактивирующих аэрозолей, оказывающих физическое или химическое воздействие на облако опасных веществ. Механизмы дезактивации могут различаться в зависимости от нейтрализуемого объекта и применяемого дезактивирующего агента. Частицы или капли аэрозоля могут адсорбировать вредные частицы или газы, вступать с ними в реакцию, обладать каталитической активностью для разложения вредных веществ, уничтожать микроорганизмы и т. д.

Часто на практике возникают ситуации, когда необходимо создать дезактивирующее облако аэрозоля за малый промежуток времени в труднодоступной зоне. В этом случае используется импульсное распыление с применением энергии высокоэнергетических материалов (ВЭМ) [1]. Преимуществом такого способа распыления является возможность очень быстро создавать облако дезактивирующего аэрозоля, частицы которого имеют достаточно большую площадь поверхности. При распылении жидких сред малый размер капель обусловлен кавитационными процессами, происходящими в распылителе [2–5]. При таком способе распыления частицы порошка также имеют высокую дисперсность [1], поскольку в экстремальных импульсных процессах агломераты частиц разрушаются.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (код проекта 22-69-00108).

© Гаенко О. И., Конюхов И. Е., Муравлев Е. В., Кудряшова О. Б., Титов С. С., Клименко В. А., 2024

В работе [6] представлена математическая модель работы импульсного распылителя, использующего энергию ВЭМ, а в работе [5] приведены некоторые данные о распространении частиц “взрывного” аэрозоля в пространстве. С помощью энергии ВЭМ облако дезактивирующего аэрозоля с частицами размером не более 30 мкм удастся создать в течение нескольких миллисекунд. При этом эффективность дезактивации зависит не только от размеров и физико-химических свойств частиц, но и от их концентрации в пространстве и при осаждении на поверхностях, а также от времени, в течение которого они находятся в помещении.

Целью данной работы является исследование с помощью экспериментальных методов и методов математического моделирования процессов импульсного распыления и распространения в пространстве частиц дезактивирующего аэрозоля.

1. Математическая модель импульсного распыления. Импульсный распылитель представляет собой устройство, в основании которого заложен заряд ВЭМ, а выше находится слой распыляемого материала (рис. 1). После срабатывания заряда ВЭМ из сопла распылителя истекают газообразные продукты реакции, несущие частицы аэрозоля. Таким способом можно распылить как жидкость, так и порошок. В работе [1] показано, что разлет частиц из сопла происходит за время, составляющее несколько миллисекунд. При этом формируется облако аэрозоля размером несколько сантиметров. Небольшой размер области разлета частиц обусловлен тем, что частицы малого размера быстро тормозятся в воздухе.

Для оценки начальных размеров облака частиц примем модель, подробно описанную в работе [6]. Под действием энергии взрыва заряда ВЭМ частицы распыляемого вещества разлетаются с начальной скоростью u_{p0} в виде симметричного сферического облака. Предположим, что начальная скорость частиц не зависит от их размера и равна начальной скорости продуктов взрыва заряда ВЭМ (скорости звука при комнатной температуре) $u_{p0} = 340$ м/с.

Уравнение движения частицы радиусом r_p имеет вид

$$\frac{4}{3} \pi \rho_p r_p^3 \frac{du_p}{dt} = -\pi r_p^2 C_D \frac{\rho u_p^2}{2}, \quad (1)$$

где ρ_p , ρ — плотность частицы и воздуха соответственно; r_p — радиус частицы; u_p — скорость частицы; C_D — безразмерный коэффициент сопротивления, зависящий от числа Рейнольдса $Re = 2r_p \rho u_p / \mu$; μ — динамическая вязкость воздуха. Характерное значение

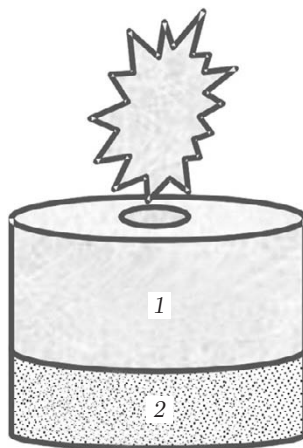


Рис. 1. Схема импульсного распылителя:
1 — порошок или жидкость, 2 — ВЭМ

числа Рейнольдса в рассматриваемой задаче находится в диапазоне $1 < \text{Re} < 900$. Тогда коэффициент сопротивления можно вычислить по формуле [7]

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}} + \frac{4}{\sqrt[3]{\text{Re}}}.$$

Интеграл уравнения (1) имеет вид

$$u_p(t) = 3\sqrt{6} \frac{\mu}{\rho_p r_p} \left[\left(1 + \frac{6}{\text{Re}_0^{2/3}} \right) \exp \left(\frac{3\mu}{\rho_p r_p^2} t \right) - 1 \right]^{-3/2}, \quad (2)$$

где Re_0 — значение числа Рейнольдса при $t = 0$.

Расстояние r_{c0} , пройденное частицей, определяется путем интегрирования уравнения (2):

$$r_{c0} = \int_0^{t_k} u_p(t) dt.$$

Здесь значение верхнего предела интегрирования t_k соответствует значению скорости частицы $u_p(t_k) = 0,01u_{p0}$. Выполним оценку скорости и расстояния, пройденного частицами различного размера, при следующих исходных данных: $\rho_p = 4,23 \cdot 10^3$ кг/м³ (плотность частиц диоксида титана), $\rho = 1,205$ кг/м³, $\mu = 1,81 \cdot 10^{-5}$ Па·с, $u_{p0} = 340$ м/с. Время разлета частиц диоксида титана радиусом 1 и 15 мкм составляет 0,24 и 30,00 мс соответственно, начальный радиус r_{c0} облака частиц оксида титана — 0,56 и 8,00 см соответственно.

Дальнейшее распространение облака аэрозоля происходит значительно медленнее, за счет процессов диффузии. При этом наблюдается гравитационное осаждение частиц.

1.1. *Диффузионное распространение облака аэрозоля.* Распространение аэрозоля, состоящего из мелкодисперсных частиц, происходит по механизму диффузии. При этом скорость диффузии значительно больше скорости броуновского движения. Это объясняется наличием хаотичных микропотоков воздуха, обусловленных возмущением газообразных продуктов реакции ВЭМ. В [6] экспериментально определен эффективный коэффициент диффузии при распространении капель воды, распыляемой импульсным способом. Его значение равно $D = 0,0016$ м²/с. При этом характерный радиус капель воды составил $r_p = 7,5$ мкм. Коэффициент диффузии пропорционален абсолютной температуре и обратно пропорционален радиусу частиц и вязкости воздуха [8]:

$$D \sim \frac{T}{\mu r_p} = \frac{D_0}{r_p}. \quad (3)$$

Коэффициент пропорциональности D_0 определим из условия $D = D_0/r_p = 0,0016$ м²/с. Следует отметить, что параметр D_0 является свободным параметром модели, требующим уточнения в эксперименте для конкретных условий.

Решена задача о диффузии аэрозольных частиц, сосредоточенных в начальный момент времени в точке, получена формула для расчета среднего расстояния r_m , которое проходит частица в течение времени t [8]:

$$r_m(t) = \sqrt{6Dt}. \quad (4)$$

В этом случае радиус облака частиц будет увеличиваться за счет диффузии на величину r_m :

$$r_c(t) = r_{c0} + r_m = r_{c0} + \sqrt{6Dt}.$$

1.2. *Гравитационное осаждение облака.* Микропотоки воздуха, инициированные истечением газов из сопла, ускоряют диффузию частиц в пространстве. Кроме того, вблизи стен экспериментальной камеры имеются конвективные потоки. В работе [5] приведена зависимость относительной массы осевших частиц от времени в условиях конвективного режима осаждения:

$$\frac{m_p(t)}{m_{p0}} = 1 - \exp\left(-\frac{u_s t}{H}\right).$$

Здесь $m_p(t)$ — масса частиц, осевших к моменту времени t ; m_{p0} — начальная масса частиц; H — расстояние между частицей и поверхностью, на которой происходит осаждение; u_s — скорость стока осаждения:

$$u_s = \frac{2r_p^2(\rho_p - \rho)}{9\mu} g,$$

g — ускорение свободного падения. Тогда относительная массовая концентрация частиц, остающихся в воздухе в момент времени t , равна

$$C_m(t) = \frac{1}{V_c} \left(1 - \frac{m_p(t)}{m_{p0}}\right) = \frac{1}{V_c} \exp\left(-\frac{u_s t}{H}\right), \quad (5)$$

где V_c — объем экспериментальной камеры.

1.3. *Характерные времена диффузионного распространения и осаждения облака.* Характерное время гравитационного осаждения определяется выражением

$$t_{sk} = \frac{H}{2u_s}.$$

Частица оксида титана радиусом 0,5 мкм оседает на дно камеры с высоты, равной 0,5 м, приблизительно через 33 мин, частица радиусом 3 мкм — через 55 с.

Пусть центр начального аэрозольного облака находится на расстоянии H_w от стенки. Тогда можно определить время, в течение которого граница облака достигает стенки в результате диффузии:

$$t_d = \frac{(H_w - r_{c0})^2}{6D}.$$

1.4. *Осаждение на стенках в результате диффузии.* Скорость осаждения на вертикальной стенке пропорциональна концентрации частиц в пространстве [5]:

$$\frac{dm_p}{dt} = -\beta m_p. \quad (6)$$

Коэффициент β пропорционален коэффициенту диффузии: $\beta = \beta_0 D$, коэффициент пропорциональности β_0 является свободным параметром модели.

Решение уравнения (6) можно представить в виде экспоненциальной зависимости. Запишем его для относительной массовой концентрации частиц:

$$C_m(t) = \frac{1}{V_c} \left(1 - \frac{m_p(t)}{m_{p0}}\right) = \frac{1}{V_c} e^{-\beta t}. \quad (7)$$

Зависимость (7) аналогична зависимости (5). Для малых частиц показатель экспоненты зависит от параметров диффузии, но через промежуток времени, необходимый для достижения частицами дна камеры за счет гравитации, будет определяться также гравитационным осаждением.

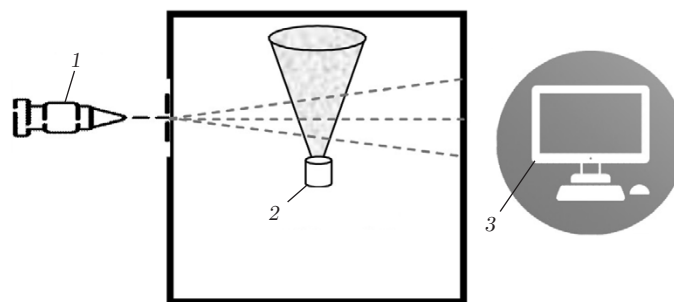


Рис. 2. Схема экспериментальной установки:

1 — лазер, 2 — распылитель, 3 — компьютер

2. Эксперимент по распылению порошка оксида титана импульсным распылителем. В эксперименте распылялся порошок оксида титана с наноразмерными частицами. Выбор порошка TiO_2 обусловлен фотокаталитической активностью этого материала. Данное свойство частиц обеспечивает нейтрализацию вредных веществ без образования токсичных продуктов [9]. При этом чем выше дисперсность распыленного порошка, тем выше эффективность нейтрализации вредных веществ.

Использовался импульсный распылитель (см. рис. 1). Распыление порошка с помощью импульсного генератора, использующего энергию ВЭМ, позволяет раздробить агломераты частиц и достичь более высокой дисперсности аэрозоля.

Аэрозольное облако создавалось в центре кубической камеры объемом 1 м^3 (рис. 2). Концентрация и дисперсность частиц аэрозоля измерялись с помощью установки дистанционного лазерного зондирования ЛИД-2М [10].

На стенках камеры устанавливались пластины для сбора осажденных частиц. До начала и после окончания эксперимента проводились исследования порошка с помощью микроскопа OLYMPUS OMEC DC130. Изображения были получены с разрешением до $0,7 \text{ мкм}$. Полученные данные анализировались с помощью программного обеспечения OLYMPUS Particle Image Processor (PIP 9.0).

3. Результаты исследования и их обсуждение. Ниже приводятся результаты расчета и эксперимента по распылению порошка TiO_2 .

3.1. Модельные расчеты. На рис. 3 показана зависимость от времени относительной массовой концентрации остающихся в воздухе частиц различного радиуса при гравитационном осаждении с учетом конвекции, рассчитанная по формуле (5). В расчетах объем камеры принят равным $V_c = 1 \text{ м}^3$, высота $H = 0,5 \text{ м}$. Плотность частиц соответствует плотности оксида титана.

На рис. 4 приведены зависимости характерного времени достижения частицей стенки t_d и времени осаждения t_{sk} от радиуса частиц (расстояние до дна и стенки камеры равно $0,5 \text{ м}$). Параметр D_0 , используемый при расчете коэффициента диффузии, определен экспериментально и равен $2,59 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$.

Для частиц оксида титана радиусом менее 3 мкм определяющим процессом является диффузия, а при радиусе частиц более 3 мкм диффузией можно пренебречь. Однако следует отметить, что даже если преобладающим механизмом осаждения является диффузия, по достижении времени t_{sk} на движение частиц начинает оказывать влияние гравитационное осаждение. Таким образом, к частицам, осевшим на дно камеры за счет диффузии, добавляются частицы, осевшие за счет гравитации. Поэтому масса частиц, осевших на дно камеры, больше массы частиц, осевших на стенках и потолке, что подтверждает эксперимент (см. подп. 3.4).

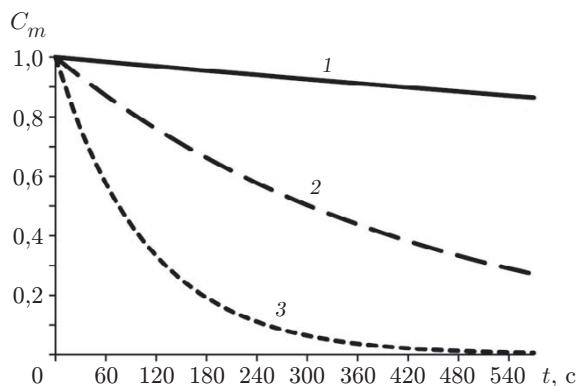


Рис. 3

Рис. 3. Зависимость от времени относительной концентрации аэрозоля при гравитационном осаждении с учетом конвекции для частиц оксида титана различного радиуса:

1 — $r_p = 0,5$ мкм, 2 — $r_p = 1,5$ мкм, 3 — $r_p = 3$ мкм

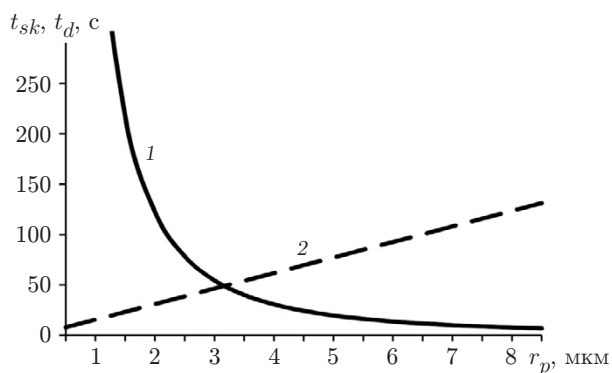


Рис. 4

Рис. 4. Зависимости характерного времени гравитационного осаждения t_{sk} (1) и диффузии t_d (2) частиц от их радиуса

3.2. Характерный размер частиц в эксперименте. Согласно данным гранулометрического анализа среднемассовый диаметр частиц порошка оксида титана до распыления составлял 2,4 мкм. После распыления аэрозольные частицы имели среднемассовый диаметр, равный 0,625 мкм. Уменьшение характерных размеров частиц объясняется дроблением агломератов в процессе распыления.

Как показано выше, основным процессом, определяющим распространение мелкодисперсного аэрозоля, является диффузия. Гравитационное осаждение начинается приблизительно через 85 мин после распыления.

Результаты эксперимента показывают, что распределение концентрации частиц в пространстве камеры становится равномерным в течение 5 с. Это время, за которое граница облака частиц достигает стенки камеры. Тогда в соответствии с уравнением (4) коэффициент диффузии равен $D = 0,083 \text{ м}^2/\text{с}$, в соответствии с уравнением (3) коэффициент пропорциональности равен $D_0 = 2,59 \cdot 10^{-9} \text{ м}^3/\text{с}$.

3.3. Концентрация частиц и определение свободных параметров модели. На рис. 5 приведены зависимости относительной концентрации аэрозоля от времени, полученные в эксперименте и в расчете по формуле (7). Свободный параметр β равен $0,004 \text{ с}^{-1}$. Точность аппроксимации составила 0,94. Относительная масса аэрозоля определяется по формуле $C_m = m_a/(m_p V_c)$, где m_a/V_c — экспериментально измеренная абсолютная концентрация аэрозоля в камере объемом V_c ; m_p — масса распыляемого порошка.

Полагая параметр β пропорциональным коэффициенту диффузии: $\beta = \beta_0 D$, получаем значение $\beta_0 = 0,48 \text{ м}^{-2}$. Полученные оценки свободных параметров модели могут быть использованы в дальнейших расчетах.

3.4. Осаждение частиц на стенках и дне камеры. Как показывают расчеты, основным механизмом осаждения частиц является диффузия. Осаждение на стенках, потолке и дне камеры в результате диффузии начинается через 5 с после распыления (с учетом характерного размера частиц). Согласно результатам эксперимента через 10 мин в камере остается лишь 10 % первоначальной массы распыленных частиц, остальные частицы осаждаются на поверхностях камеры. Учитывая экспоненциальный характер динамики процесса,

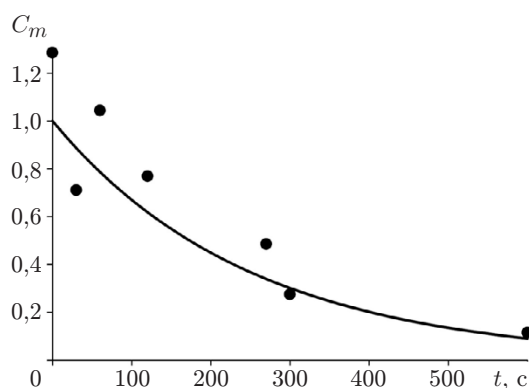


Рис. 5. Зависимость относительной концентрации аэрозоля от времени: точки — эксперимент, линия — расчет по формуле (7) при $\beta = 0,004 \text{ с}^{-1}$

частицы, масса которых составляет 10 % исходной массы, будут осаждаться в течение длительного времени (в пределе до бесконечности). Приблизительно через 85 мин к процессу диффузии добавляется гравитационное осаждение.

Осаждение на дне камеры большого количества частиц обусловлено также тем, что аэрозоль не является монодисперсным. Среднемассовый диаметр частиц приблизительно равен 1 мкм, но некоторые частицы имеют значительно бóльшие размеры. Как показывают расчеты (см. рис. 3), в случае если радиус частицы оксида титана превышает 3 мкм, она осаждается на дно камеры за счет гравитации быстрее, чем достигнет стенки или потолка за счет диффузии.

На стенках и дне камеры были размещены предметные стекла размером 3×3 мм для сбора частиц. Через 3 ч после распыления (к этому моменту измерительный прибор ЛИД-2М не фиксировал наличие частиц в воздухе камеры) среднее число частиц на предметных стеклах, расположенных на всех поверхностях камеры (кроме дна), составило 43 ± 3 (среднемассовый диаметр частиц приблизительно равен 0,8 мкм). На предметных стеклах, находящихся на дне камеры, количество частиц со среднемассовым диаметром 4,6 мкм составляло в среднем 117 ± 40 .

Заключение. В работе описаны математическая модель и эксперимент по распылению взрывного аэрозоля. Учитываются особенности распространения аэрозоля, созданного взрывным способом: скорость образования облака, малый размер частиц, возмущение воздуха газообразными продуктами реакции ВЭМ. В эксперименте фиксируется изменение концентрации частиц и их размеров в пространстве и времени, а также относительная масса осажденных на поверхностях камеры частиц.

Расчеты показывают, что время и направление (дно, стенки, потолок) осаждения аэрозоля существенно зависят от размеров частиц. Например, частицы оксида титана диаметром менее 3 мкм быстрее достигают стенок камеры, а не дна. Установлено, что распространение облака частиц при взрывном распылении невозможно рассматривать в приближении броуновской диффузии вследствие значительного возмущения воздуха газообразными продуктами реакции. Получено значение эффективного коэффициента диффузии и зависящих от него свободных параметров модели.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kudryashova O. B., Stepkina M. Y., Korovina N. V., et al. Atomization of nanopowders for adsorption of toxic substances // J. Engng Phys. Thermophys. 2015. V. 88, N 4. P. 833–838.

2. **Стебновский С. В.** О механизме импульсного разрушения жидкого объема // ПМТФ. 1989. № 2. С. 126–132.
3. **Кедринский В. К.** Гидродинамика взрыва // ПМТФ. 1987. № 4. С. 23–48.
4. **Стебновский С. В.** Импульсное диспергирование как предельный режим разрушения жидкого объема // Физика горения и взрыва. 2008. Т. 44, № 2. С. 117–128.
5. **Кедринский В. К.** Поверхностные эффекты при подводном взрыве (обзор) // ПМТФ. 1978. № 4. С. 66–87.
6. **Kudryashova O. B., Korovina N. V., Pavlenko A. A., et al.** Aerosol cloud propagation in a closed space // J. Engng Phys. Thermophys. 2015. V. 88, N 3. P. 568–574.
7. **Nigmatulin R. I.** Dynamics of multiphase media. V. 2 / R. I. Nigmatulin, J. C. Friedly. S. l.: CRC Press, 1990.
8. **Landau L. D.** Fluid mechanics. V. 6 / L. D. Landau, E. M. Lifshitz. Oxford etc: Pergamon Press, 2013.
9. **Molina-Reyes J., Romero A., Uribe H., et al.** Study on the photocatalytic activity of titanium dioxide nanostructures: nanoparticles, nanotubes and ultra-thin films // Catalysis Today. 2020. V. 341. P. 2–12.
10. **Ахмадеев И. Р.** Метод и быстродействующая лазерная установка для исследования генезиса техногенного аэрозоля по рассеянию луча в контролируемом объеме: Дис. . . . канд. техн. наук. Бийск, 2008.

*Поступила в редакцию 10/X 2023 г.,
после доработки — 7/XI 2023 г.
Принята к публикации 27/XI 2023 г.*
