

МЕТОД РАСЧЕТА РЕСУСПЕНЗИИ, ОСНОВАННЫЙ НА СОЧЕТАНИИ ДЕТЕРМИНИРОВАННОГО И СТАТИСТИЧЕСКОГО ПОДХОДОВ

Д. В. Цаплин, В. Н. Пискунов*

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Представлен метод расчета процесса вторичного пылеобразования, объединяющий детерминированный и статистический подходы для описания ветрового подъема (ресуспензии) покоящихся и катящихся по поверхности частиц. Этот метод использует модель rock'n roll, основанную на статистическом подходе, ограничивая ее действие пороговым диаметром частиц, отделяющим неподвижные частицы от катящихся. Считается, что ресуспензия катящихся частиц происходит мгновенно, если действующая на них аэродинамическая подъемная сила превышает их вес. В расчетах учитывается, что крупные и слишком тяжелые частицы катятся по поверхности, не участвуя в процессе ресуспензии. На основе описанных алгоритмов выполнены расчеты, которые обнаруживают хорошее согласие результатов с экспериментом.

Ключевые слова: ресуспензия, взаимодействие частиц с поверхностью, спектры частиц, моделирование вторичного пылеобразования.

Введение

Процесс ветрового подъема частиц с подстилающих поверхностей в приповерхностный слой атмосферы (ресуспензия) играет важную роль в перераспределении загрязняющих веществ (в том числе и радиоактивных) по поверхности после их выпадения. Описание ресуспензии включает в себя широкий круг сложных детерминированных и стохастических процессов.

Существующие теоретические модели ресуспензии разбиваются на два типа [1]: квазистатистические модели, которые основаны на соотношении моментов и сил, действующих на частицу в воздушном потоке, и динамические, использующие энергетический баланс частицы в потенциальной яме адгезии. Кроме того, можно выделить статистический и детерминированный подходы к описанию ресуспензии. При статистическом подходе определяется скорость ресуспензии частиц с под-

стилающей поверхности под действием турбулентного ветрового потока. В этом подходе обычно учитываются флуктуации аэродинамических сил, турбулентные пульсации и разброс сил адгезии, действующих на частицы. Примерами моделей, основанных на статистическом подходе, могут служить rock'n roll модель [2, 3] и модель, использующая турбулентные пульсации потока [4, 5].

Детерминированный подход позволяет оценить пороговую динамическую скорость трения для начала ресуспензии частиц заданного размера u_{th} . Во многих моделях [6, 7] эта пороговая скорость определяется из необходимого для начала ее качения по поверхности баланса моментов, действующих на частицу. Можно также говорить о пороговом диаметре частиц D_{th} для заданной скорости течения.

В данной работе представлен метод расчета, объединяющий детерминированный и статистиче-

* E-mail: D. V. Tsaplin@itmf.vniief.ru

ский подходы при описании ресуспензии. Сначала из баланса моментов, действующих на частицу в вязком подслое, определяется величина порогового диаметра D_{th} . Крупные частицы с диаметром $D > D_{th}$ начинают катиться по поверхности, поэтому они ресуспензируют мгновенно, если действующая на них аэродинамическая подъемная сила превышает вес частиц. Для оценки ресуспензии мелких частиц, остающихся неподвижными, используются скорости ресуспензии, полученные либо в модели rock'n roll либо в модели, основанной на турбулентных пульсациях. Таким образом, механизмы ресуспензии неподвижных и катящихся частиц различны, в этом состоит основное отличие предложенного метода расчета от статистических моделей [2–5]. Отметим, что слишком крупные и тяжелые частицы катятся по поверхности, не участвуя в процессе ресуспензии, и это также учитывается в расчетах.

В первом разделе предложены формулы для определения пороговых диаметра и скорости трения с использованием баланса моментов, действующих на частицу в вязком подслое, и описан алгоритм расчета ресуспензии в предлагаемом методе. На основе этого алгоритма написана программа с использованием прикладного пакета программ MATLAB, предназначенная для расчета краткосрочной ресуспензии.

Во втором разделе расчеты, выполненные по этой программе, сравниваются с экспериментальными измерениями краткосрочной ресуспензии [2]. Результаты сравнения показывают, что данный метод лучше согласуется с результатами измерений, чем обычная rock'n roll модель.

1. Описание модели и алгоритма расчета ресуспензии

Сначала рассмотрим модель для определения пороговых скорости трения и диаметра катящихся частиц. В этой модели рассматривается действие сил и их моментов относительно центра вращения O на частицу радиуса R , находящуюся в вязком подслое на поверхности (рис. 1).

Аэродинамическая подъемная сила F_L и вес частицы $m_p g$ значительно меньше силы адгезии F_A и силы лобового сопротивления F_D , поэтому ими и их моментами можно пренебречь [6]. Следовательно, для качения частицы необходимо,

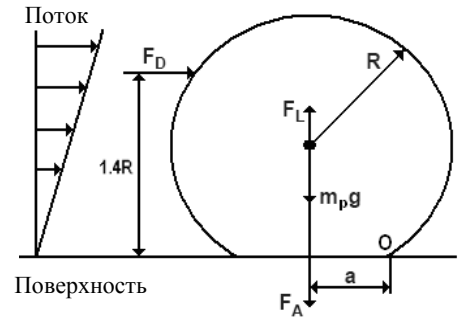


Рис. 1. Схема сил, действующих на частицу в вязком подслое

чтобы момент силы лобового сопротивления M_D превышал момент адгезии M_A (знак равенства отвечает пороговому значению):

$$M_D/M_A \geq 1. \quad (1)$$

Момент силы лобового сопротивления вычисляется из выражения [8]:

$$M_D = 1,4F_D R = 5,61\rho_f u_*^2 D^3, \quad (2)$$

где ρ_f — плотность воздуха, u_* — динамическая скорость трения, D — диаметр частицы и F_D — сила лобового сопротивления, которая определяется как [9]:

$$F_D = 2,55\pi\rho_f u_*^2 D^2. \quad (3)$$

Момент сил адгезии определяется из произведения силы адгезии на радиус контакта частицы с поверхностью — a :

$$M_A = F_A a, \quad (4)$$

Из-за шероховатости поверхности сила адгезии имеет логнормальное распределение со средним значением $\langle F_A \rangle$ и шириной разброса σ_A :

$$\varphi(F_A) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{F_A \ln \sigma_A} \right) \exp \left(-\frac{1}{2} \left\{ \frac{\ln(F_A/\langle F_A \rangle)}{\ln \sigma_A} \right\}^2 \right). \quad (5)$$

Среднее значение силы адгезии и радиус контакта частица — поверхность оцениваются с использованием модели адгезии JKR [10]:

$$\langle F_A \rangle = rF_A^{JKR} = r3\pi\gamma D/4, \quad (6)$$

$$a = \left(\frac{3\pi\gamma D^2}{8E} \right)^{1/3}, \quad (7)$$

где r — коэффициент редукции, связанный с уменьшением адгезии на шероховатой поверхности,

F_A^{JKR} – сила адгезии на гладкой поверхности, γ – поверхностная энергия и E – составной модуль Юнга для контакта частица – поверхность:

$$\frac{1}{E} = \frac{3}{4} \left(\frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2} \right) \quad (8)$$

(E_1, E_2 – модули Юнга, а ν_1, ν_2 – коэффициенты Пуассона контактирующих материалов).

Подставляя выражения (2) и (4) в соотношение (1), получим формулу для оценки пороговой скорости трения, при которой начинается качение частиц диаметром D :

$$u_*^{th} = 0,433 \left(\frac{(F_A(D))^3 \gamma}{\rho_f^3 E D^7} \right)^{1/6}, \quad (9)$$

а также выражение для порогового диаметра катящихся частиц, на которые действует поток с динамической скоростью трения u_* :

$$D_{th} = 0,489 \left(\frac{(F_A(D))^3 \gamma}{\rho_f^3 E u_*^6} \right)^{1/7}. \quad (10)$$

Крупные частицы диаметром больше D_{th} под действием потока начинают катиться по поверхности. Влиянием сил адгезии на катящиеся частицы можно пренебречь, поэтому эти частицы мгновенно покидают поверхность, если аэродинамическая подъемная сила со стороны потока F_L оказывается больше их веса, т. е.:

$$F_L > m_p g = \pi \rho_p D^3 g / 6, \quad (11)$$

где m_p и ρ_p – масса и плотность частиц, а подъемная сила F_L определяется как [11, 12]:

$$F_L = 0,58 v^2 \rho_f (d_p^+)^4 \text{ при } d_p^+ < 1; \quad (12)$$

$$F_L = 20,9 v^2 \rho_f (d_p^+ / 2)^{2,31} \text{ при } d_p^+ > 1,$$

где $d_p^+ = D u_* / \nu$ и ν – кинематическая вязкость воздуха. Слишком крупные и тяжелые частицы ($F_L < m_p g$) продолжают катиться по поверхности не покидая ее и, следовательно, не участвуют в процессе ресуспензии.

Для оценки ресуспензии мелких частиц размером $D < D_{th}$ используется скорость ресуспензии, которая вычисляется из статистических моделей [2–5]. Модель *rock'n roll* [2], приводит к следующему выражению интенсивности ресуспензии p (максимальной скорости ресуспензии) частиц под действием флуктуирующей аэродинамической силы:

$$p = 0,00685 \left(\frac{u_*^2}{\nu} \right), \text{ если } [F_A - (F_L/2 + R F_D/a)] / [0,2(F_L/2 + R F_D/a)] \leq 0,75;$$

$$0,00685 \left(\frac{u_*^2}{\nu} \right) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{F_A - \left(\frac{1}{2} F_L + \frac{R}{a} F_D \right)}{0,2 \left(\frac{1}{2} F_L + \frac{R}{a} F_D \right)} \right)^2 \right\}$$

$$p = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left(\frac{F_A - \left(\frac{1}{2} F_L + \frac{R}{a} F_D \right)}{0,2 \sqrt{2} \left(\frac{1}{2} F_L + \frac{R}{a} F_D \right)} \right) \right\},$$

если $[F_A - (F_L/2 + R F_D/a)] / [0,2(F_L/2 + R F_D/a)] > 0,75;$ (13)

где $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$ – функция ошибок, F_D и

F_L – аэродинамические силы (3) и (12).

Выражение (13) получено из баланса сил, действующих на частицу в вязком подслое, предполагая, что аэродинамическая сила и ее производная по времени статистически независимы и имеют гауссово распределение. Отметим, что существуют варианты модели *rock'n roll*, использующие негауссово распределение сил [3].

Другая модель, рассматривающая подъем частиц под действием турбулентных пульсаций [4, 5], дает следующее выражение для интенсивности ресуспензии:

$$p = \frac{4,93 \cdot 10^{-5}}{\nu} \left(\frac{u_*^2}{u_*^{th}} \right)^2 = 2,63 \cdot 10^{-4} \frac{u_*^4}{\nu} \left(\frac{\rho_f E D^7}{F_A^3 \gamma} \right)^{1/3}. \quad (14)$$

В дальнейшем будет выполнено сравнение обоих вариантов, использующих формулы (13) и (14) для интенсивности ресуспензии p , с экспериментальными данными по краткосрочной ресуспензии [2].

Доля частиц, унесенных потоком воздуха за время t с единицы поверхности, определяется следующей суммой:

$$N(t) = N_{im}(t) +$$

$$+ \int_0^t \int_0^{D_{th}} \int_{D_{min}}^{\infty} p \exp(-pt) \varphi(F_A) \varphi_D(D) dD dF_A dt, \quad (15)$$

где $N_{im}(t)$ – доля легких частиц с размерами больше D_{th} , уносимых с поверхности мгновенно после начала действия потока с динамической скоростью трения u_* , поскольку на эти частицы действует подъемная сила, превышающая их вес (11). В выражении (15) также учтено, что распределение частиц по размерам $\varphi_D(D)$ ограничено минимальным диаметром частиц D_{min} . Если оказывается, что $D_{th} < D_{min}$, то все частицы считаются катящимися и второе слагаемое в выражении (15) приравнивается нулю.

С использованием численного комплекса MATLAB была написана программа, реализующая предложенный метод расчета ресуспензии.

В программе требуется задание следующих входных параметров: спектра частиц по размерам – $\varphi_D(D)$, поверхностной энергии γ и составного модуля Юнга E для контакта частица – поверхность, параметров шероховатости поверхности (коэффициента редукации r и ширины разброса сил адгезии σ_A), плотности материала частиц ρ_P , динамической скорости трения u_* и времени t , в течение которого на частицы действует поток. В результате расчетов на выходе программы получается полная доля уносимых с единицы поверхности частиц за время t потоком воздуха с постоянной скоростью трения u_* . На выходе программы можно также получить спектр уносимых частиц по размерам и другие величины, например массу вещества, поднимаемую за единицу времени с единицы поверхности в приповерхностный слой атмосферы.

2. Сравнение результатов

Результаты расчетов, полученные с помощью предложенного метода, сравнивались с измерениями краткосрочной ресуспензии частиц из окиси

алюминия и графита со стеклянной поверхности в воздушном туннеле [2]. На рис. 2–4 показаны доли унесенных с поверхности частиц после 1 секунды действия потока при различной динамической скорости трения, вычисленной по формулам (13) (штрихпунктирная линия) и (14) (сплошная кривая), а также измеренной экспериментально. Дополнительно пунктирной кривой показаны расчеты по модели rock'n'roll [2].

Из рисунков видно, что расчеты, сделанные с помощью предлагаемого метода, лучше согласуются с экспериментальными данными, чем предсказания обычной модели rock'n'roll. Особенно хорошее согласие с экспериментами показывают расчеты, использующие для интенсивности ресуспензии выражение (14), полученное по модели турбулентных пульсаций [4, 5].

Отметим, что предложенный метод не сводится к простому ограничению статистических моделей условием (11), поскольку ресуспензия неподвижных частиц наблюдается даже в том диапазоне скоростей трения, когда вес частиц превышает подъемную силу. Эти частицы накапливают достаточно энергии колебаний из турбулентного потока, чтобы преодолеть силы адгезии и своего веса.

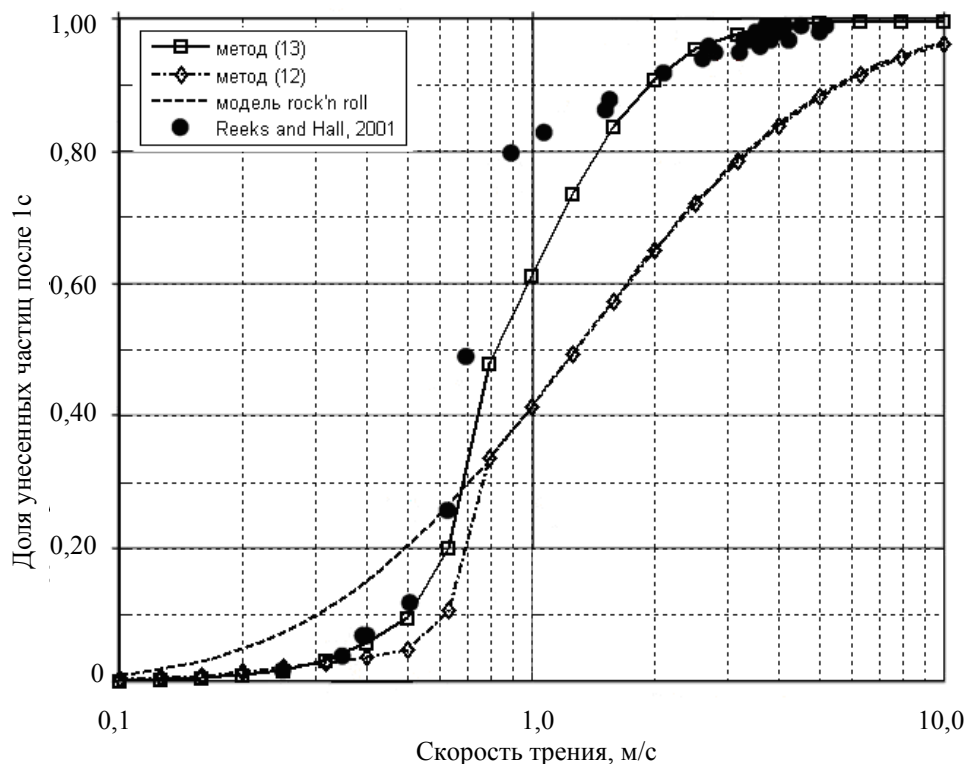


Рис. 2. Сравнение вычисленной и измеренной доли унесенных частиц из окиси алюминия номинального размера 10 мкм в зависимости от скорости трения

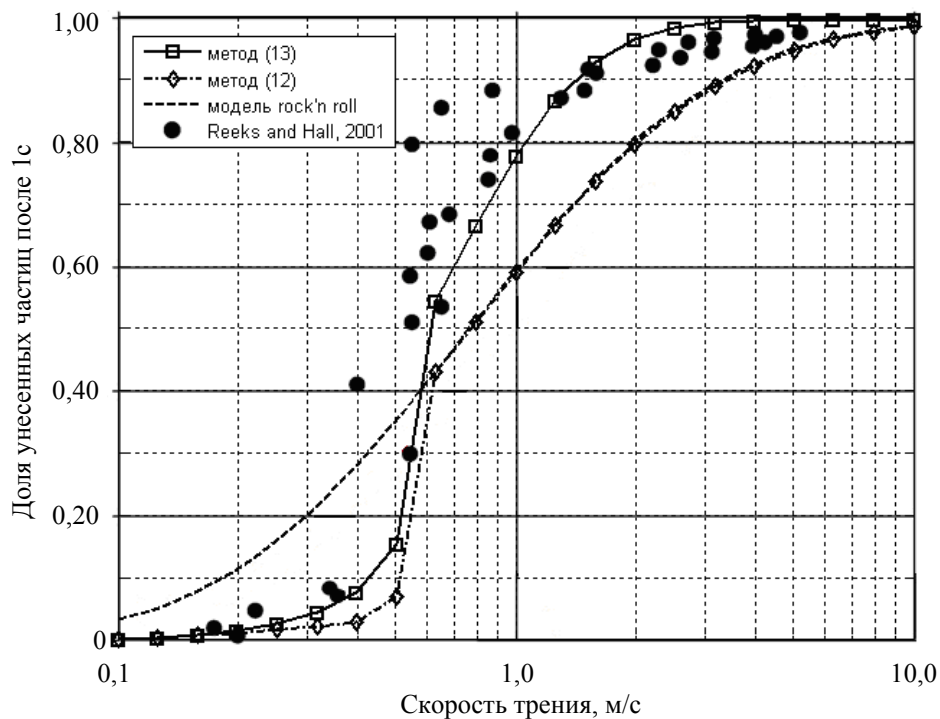


Рис. 3. Сравнение вычисленной и измеренной доли унесенных частиц из окиси алюминия номинального размера 20 мкм в зависимости от скорости трения

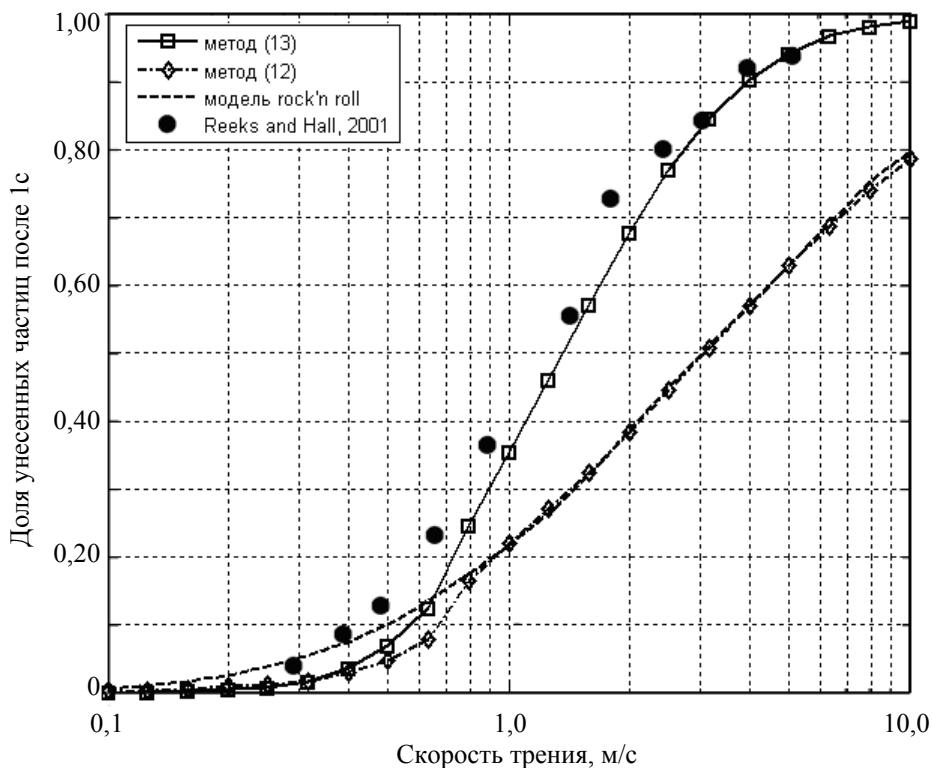


Рис. 4. Сравнение вычисленной и измеренной доли унесенных графитовых частиц номинального размера 13 мкм в зависимости от скорости трения

Заключение

В работе предложен метод, объединяющий детерминированный и статистический подходы к описанию ресуспензии. В предлагаемом методе учитывается различие механизмов ресуспензии покоящихся и катящихся по поверхности частиц. Для определения скорости ресуспензии мелких покоящихся частиц используются модели, основанные на статистическом подходе. Действие этого статистического механизма ограничено пороговым диаметром D_{th} , который отделяет мелкие неподвижные частицы. Такое разделение связано с тем, что катящиеся частицы не испытывают значительной адгезии со стороны поверхности в отличие от неподвижных частиц. Поэтому ресуспензия крупных катящихся частиц диаметра $D > D_{th}$ происходит мгновенно, если действующая на них аэродинамическая подъемная сила превышает их вес. Слишком крупные и поэтому слишком тяжелые частицы катятся по поверхности, не участвуя в процессе ресуспензии.

Представлена модель для определения порогового диаметра, которая использует баланс моментов, действующих на частицу в вязком подслое. Для расчета ресуспензии мелких частиц использованы два способа: статистическая модель rock'n roll [2, 3] и модель турбулентных пульсаций [4, 5].

Описан алгоритм расчета ресуспензии в предлагаемом методе, на основе которого написана программа, использующая прикладной пакет программ MATLAB и предназначенная для расчета краткосрочной ресуспензии. Расчеты доли унесенных с поверхности частиц после действия потока, выполненные по этой программе, сравниваются с экспериментальными измерениями краткосрочной ресуспензии [2]. Результаты этого сравнения показывают, что данный метод лучше согласуется с результатами измерений, чем обычная rock'n roll модель. Наилучшее согласие получено по модели турбулентных пульсаций [4, 5].

Предложенный метод может использоваться в численных комплексах, предназначенных для расчета атмосферного переноса и осаждения аэрозолей, чтобы учесть перераспределение загрязняющих веществ по поверхности после их выпадения за счет вторичного пылеобразования.

Список литературы

1. Ziskind G., Fichman M. and Gutfinger C. Resuspension of particulate from surfaces to turbulent flows – review and analysis // *J. Aerosol Sci.* 1995. Vol. 26, No 4. P.613.
2. Reeks M. and Hall D. Kinetic models of particle resuspension in turbulent flows: Theory and measurement // *J. Aerosol Sci.* 2001. Vol. 32. P. 1.
3. Zhang F., Reeks M. and Kissane M. Particle resuspension modeling in turbulent flows. Report 11F5 at the IAC 2010, Helsinki.
4. Cleaver J. W. and Yates B. Mechanism of detachment of colloidal particles from a flat substrate in a turbulent flow // *J. Colloid Interf. Sci.* 1973. Vol. 44. P. 464.
5. Zhu Y., Zhao B., Zhou B., and Tan Z. A particle resuspension model in ventilation ducts // *Aerosol Science and Technology* 2012. Vol. 46. P. 222.
6. Ziskind G., Fichman M. and Gutfinger C. Adhesion moment model for estimating particle detachment from a surface // *J. Aerosol Sci.* 1997. Vol. 28, No 4, P. 623.
7. Ibrahim A., Dunn P. and Brach R. Microparticle detachment from surfaces exposed to turbulent air flow: Controlled experiments and modeling // *J. Aerosol Sci.* 2003. Vol. 34. P. 765.
8. Sharma M.M. et al. Factors controlling the hydrodynamic detachment of particles from surfaces // *J. Colloid Interface Sci.* 1992. Vol. 149. P. 121.
9. O'Neill M. E. A sphere in contact with a plane wall in a slow linear shear flow // *Chem. Engng. Sci.* 1968. Vol. 23. P. 1293.
10. Johnson K. L., Kendall K. and Roberts A. D. Surface energy and the contact of elastic solids // *Proc. Roy. Soc.* 1971. A. 324. P. 301.
11. Leighton D. and Acrivos A. The lift on a small sphere touching a plane in the presence of a simple shear flow // *J. Appl. Math. Phys.* 1985. Vol. 36. P. 174.
12. Hall D. Measurements of the mean force on a particle near a boundary in turbulent flow // *J. Fluid Mech.* 1988. Vol. 187. P. 451.

Статья поступила в редакцию 18.04.2012.