

УДК 621.45.042:532.592.2:544.772

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ МЕЛКОДИСПЕРСНЫХ АЭРОЗОЛЕЙ

А.А. Антонникова, Н.В. Коровина, О.Б. Кудряшова, И.М. Васенин

Предложена физико-математическая модель испарения капель аэрозоля с учетом влажности и температуры среды, размера, температуры и физико-химических свойств вещества капель. Показано, что испарение микронных капель происходит интенсивно за счет большой удельно-массовой поверхности частиц и, как следствие, улучшения теплообмена с окружающей средой.

Ключевые слова: испарение, мелкодисперсный аэрозоль, влажность.

ВВЕДЕНИЕ

Диспергирование жидкости является одним из основных процессов, определяющих функционирование современных технических устройств, систем пожаротушения, смесеобразования, установок для нанесения упрочняющих, износостойких покрытий. В процессах диспергирования определяющими параметрами эффективности являются размер распыливаемых капель (в общем случае, функция распределения капель по размеру), концентрация частиц, пространственное распределение и скорость создания аэрозольного облака.

Потребности практики разработки компактных, безопасных автономных распылителей для диспергирования больших объемов жидкости, действующих ограниченно малое время, приводят к необходимости исследований принципов импульсного распыла. Именно импульсный способ позволяет достичь высокой скорости получения аэрозолей с высокой дисперсностью.

В получаемых импульсным способом аэрозолях присутствуют капли микронных и субмикронных размеров. Теплообмен таких капель со средой протекает интенсивно вследствие их большой удельной поверхности. Важным вопросом при этом является описание процесса испарения мелких капель в динамике, в зависимости от влажности и температуры, физико-химических свойств жидкости.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Рассмотрим среду, состоящую из воздуха и взвешенных в нем капель воды. В зависимости от влажности и разности температур капли могут либо испаряться, либо увеличиваться в размерах за счет конденсации. На-

правление и величина потоков влаги определяются разностью парциальных давлений паров воды над каплей p_{drop} и в окружающем воздухе p_{pl} согласно формуле [1]:

$$q_m = \frac{4\pi D_f M r (p_{drop} - p_{pl})}{RT} \quad (1)$$

где D_f – коэффициент диффузии, r – радиус капли, R – газовая постоянная, M – молекулярный вес, T – температура. Парциальное давление насыщенного пара можно рассчитать с помощью уравнения Клапейрона-Клаузиуса, которое имеет приближенный интеграл:

$$p_H = A e^{\frac{-MH}{RT}} \quad (2)$$

где H – теплота фазового перехода, A – константа. Значение A находят, зная значения давления насыщенного пара p_H при какой-либо температуре T по формуле:

$$A = \ln p_H + \frac{MH}{RT}$$

В аппроксимации (2) используем выражение с константой A

$$C): p_H = 2338,8e^{\frac{2\sigma M}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{293} \right)}$$

Для расчета парциального давления P_{drop} над каплей применим формулу:

$$p_{drop} = e^{\rho_{ж} RT_K r \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{293} \right)} 2338,8e^{\frac{MH}{R} \left(\frac{1}{T_K} - \frac{1}{293} \right)} \quad (3),$$

учитывающую влияние поверхностного натяжения с коэффициентом σ . В этой формуле через T_K обозначена температура капли. Когда пар в воздушной среде не является насыщенным, то вводится понятие влажности $v = p_{pl}/p_H$. Поэтому для давления пара в воздухе p_{pl} используем выражение:

$$p_{pl} = v p_H = v 2338,8e^{\frac{MH}{R} \left(\frac{1}{T_c} - \frac{1}{293} \right)}, \quad (4)$$

в котором через T_∞ обозначена температура воздуха.

Подставляя (3) и (4) в (1), получим дифференциальные уравнения для скорости изменения массы капли:

$$\frac{dm}{dt} = -\frac{4\pi D_f M r}{RT_\infty} 2338,8 \left(e^{\frac{2\sigma M}{\rho_{ж} RT_K r}} e^{\frac{MH}{R} \left(\frac{1}{T_K} - \frac{1}{293} \right)} - v e^{\frac{MH}{R} \left(\frac{1}{T_\infty} - \frac{1}{293} \right)} \right)$$

Учитывая, что $m = \frac{4}{3} \pi r^3 \rho_{ж}$, найдем уравнение

для скорости изменения радиуса капли:

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{D_f M r}{2\rho_{ж} RT_\infty} 2338,8 \times \left(e^{\frac{2\sigma M}{\rho_{ж} RT_K r}} e^{\frac{MH}{R} \left(\frac{1}{T_K} - \frac{1}{293} \right)} - v e^{\frac{MH}{R} \left(\frac{1}{T_\infty} - \frac{1}{293} \right)} \right), \quad (5)$$

При выводе уравнения для температуры капли учтем 2 причины её изменения:

1) теплообмен между каплей и окружающим её газом;

2) унос энергии вместе с испаряющейся массой.

Тепловой поток q_T при теплообмене сферы с окружающей средой учтем по формуле:

$$q_T = s\alpha(T_\infty - T_K), \quad (6)$$

в которой $s=4\pi r^2$ – площадь поверхности капли, $\alpha=\lambda/r$ – коэффициент кондуктивного теплообмена, λ – коэффициент теплопроводности газа. Подставляя s и α в формулу (5), получим:

$$q_T = 4\pi r^2 \frac{\lambda}{r} (T_\infty - T_K).$$

Для теплового потока при испарении капли имеем:

$$q_{исп} = (cT_K + H) \frac{dm}{dt} = -(cT_K + H) \frac{4\pi D_f r M}{RT} (p_{drop} - vp_H)$$

где c – теплоемкость жидкости.

Таким образом, суммарное изменение количества тепла в капле в единицу времени:

$$cm \frac{dT}{dt} = 4\pi r^2 \frac{\lambda}{r} (T_\infty - T_K) - (cT_K + H) \frac{4\pi D_f r M}{RT} (p_{drop} - vp_H) \quad (7)$$

При вычислении влажности будем предполагать, что нам известна начальная масса частиц в единице объема m_0 . Тогда число частиц можно вычислить по формуле:

$$n_0 = \frac{m_0}{\frac{4}{3} \pi r_0^3 \rho_{ж}}, \quad (8)$$

где r_0 – начальный радиус частиц.

Так как при испарении число капель не изменяется, то масса частиц в процессе их испарения будет равна $m = n_0 \frac{4}{3} \pi r_0^3 \rho_{ж}$,

а масса испарившейся жидкости $\bar{m} = m_0 - m$.

Масса пара в единице объема газа в начальный момент времени совпадает с парциальной плотностью этого пара и может быть найдена из уравнения состояния:

$$M_{H0} = \frac{p_{pl0} M}{RT_{\infty 0}},$$

в котором индексом 0 помечены начальные значения.

Но $p_{pl0} = v_0 p_{H0}$, где p_{H0} – давление насыщенного пара в начале процесса, а v_0 – начальная влажность среды. Следовательно,

$$M_{H0} = \frac{v_0 p_{H0} M}{RT_{\infty 0}}.$$

В произвольный момент времени масса пара в газовой среде равна: $M_{H0} + \bar{m}$, а текущая влажность:

$$v = \frac{M_{H0} + \bar{m}}{M_H},$$

где $M_H = \frac{p_H M}{RT_\infty}$ – масса насыщенного пара

при температуре T_∞ .

Для расчета температуры газа T_∞ воспользуемся законом сохранения тепловой энергии в системе, состоящей из n_0 капель и окружающего их газа. В начальный момент времени тепловая энергия этой системы:

$$E_0 = m_0 c T_{K0} + (M_{H0} c_{рнар} + M_v c_{pv}) T_{\infty 0}, \quad (9)$$

где $c_{рнар}$ – теплоемкость пара; c_{pv} – теплоемкость воздуха; M_v – масса воздуха в единице объема; индексом 0 отмечены значения параметров в начальный момент времени.

В последующие моменты времени тепловая энергия смеси составит:

$$E = mc T_K + ((M_{H0} + \bar{m}) c_{рнар} + M_v c_{pv}) T_\infty, \quad (10)$$

В результате испарения часть тепловой энергии, равная $\bar{m}H$, переходит во внутреннюю энергию пара. Поэтому:

$$E_0 - E = \bar{m}H, \quad (11)$$

Подставляя в (11) величины E_0 и E из соотношений (9) и (10) и разрешая его относительно T_∞ найдем:

$$T_{\infty} = \frac{m_0 c T_{K0} - m c T_K + (c_{\text{пар}} M_{H_2O} + M_v c_{pv}) T_{\infty 0} - \bar{m} H}{[(M_{H_2O} + \bar{m}) c_{\text{пар}} + M_v c_{pv}]} \quad (12)$$

Уравнения (5), (7), (8), (12) позволяют в процессе испарения массы монодисперсных капель рассчитать их радиус, температуру, а также влажность и температуру воздуха. При численном интегрировании без применения специальных алгоритмов при малых r возникает неустойчивость численного решения, обусловленная жёсткостью дифференциального уравнения (7), содержащего в знаменателе правой части величину r^2 . Поэтому при решении уравнения (7) применялась неявная разностная схема, в которой правая часть этого уравнения на каждом шаге линеаризовалась по малому приращению температуры $T_K^{n+1} - T_K^n$. Полученный таким способом разностный аналог уравнения (5) разрешался относительно T_K^{n+1} . Численными расчетами была показана устойчивость и сходимость схемы вплоть до радиуса $r=1\text{нм}$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Все расчеты проводились для следующих значений параметров: $\lambda=0,024$ Дж/м К, $c=4217$ Дж/кг К, $M_v=1,205$ кг/м³, $\rho_{\text{ж}}=998$ кг/м³, $H=2257000$ Дж/кг, $\sigma=0,075$ Н/м, $C_{pv}=1005$ Дж/кг °К, $C_{p \text{ пар}}=1860$ Дж/кг К, $T_{K0}=293$ К, $T_{\infty 0}=293$ К. Радиус капель – 1...15 мкм, концентрация аэрозоля 1 и 3 г/м³, начальная влажность – 60 %, 90 %.

На рисунке 1 показана относительная убыль массы монодисперсного аэрозоля с диаметром частиц 20 мкм, концентрацией 3 г/м³, рассчитанная в соответствии с предложенной моделью. Это соответствует картине, наблюдаемой в эксперименте: через 2-3 секунды при 60 % влажности такой аэрозоль испаряется на 90 %. При этом влажность, рассчитанная по (8), повышается до 95 %, что также наблюдается в эксперименте. При влажности 90 % испарение прекращается уже на первой секунде, убыль массы аэрозоля не превышает 20 % [2].

Рисунки 2 и 3 иллюстрируют динамику уменьшения радиуса частиц аэрозоля вследствие их испарения. При влажности 90 % испарение частиц радиуса 2 мкм происходит относительно медленно, более крупные капли – 5 мкм – лишь немного уменьшаются в размерах, после чего испарение прекращается. При влажности

60 % микронные капли (2 и 5 мкм) заметно испаряются уже за доли секунды, причем двухмикронные капли испаряются полностью за время около 150 мс.

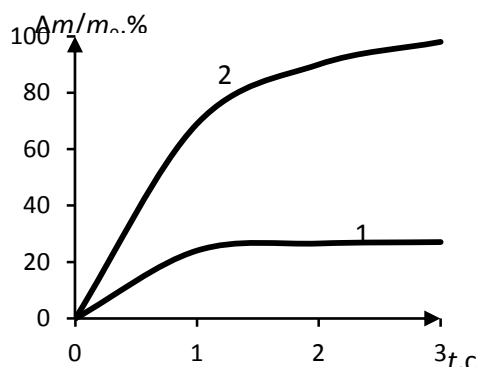


Рисунок 1 – относительная убыль массы аэрозоля $d=20$ мкм, концентрация 3 г/м³: 1 – влажность 90 %, 2 – влажность 60 %

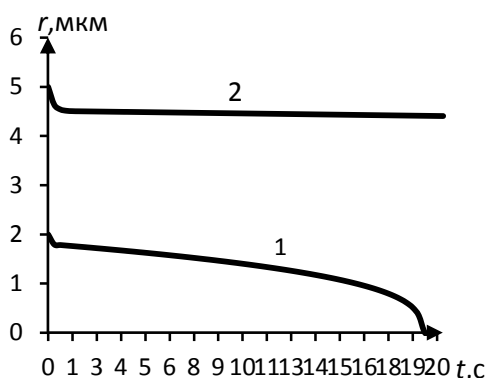


Рисунок 2 – Динамика изменения радиуса капли аэрозоля, концентрация 3 г/м³, влажность 90 %: 1 – начальный радиус капли $r_0=2$ мкм, 2 – $r_0=5$ мкм

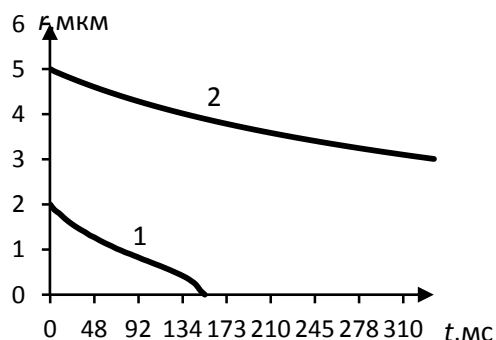


Рисунок 3 – Динамика изменения радиуса капли аэрозоля, концентрация 3 г/м³, влажность 60 %: 1 – начальный радиус капли $r_0=2$ мкм, 2 – $r_0=5$ мкм

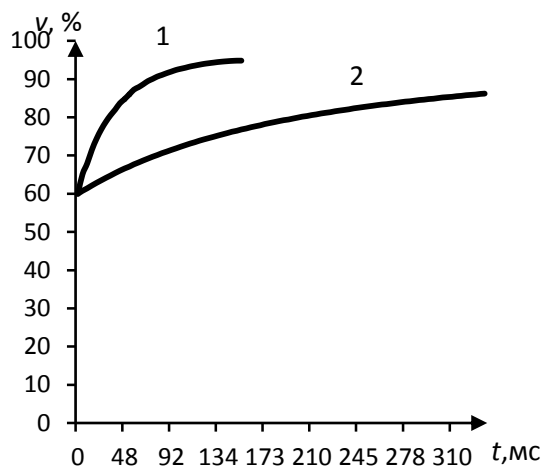


Рисунок 4 – Изменение влажности в аэрозолях разной дисперсности, концентрация 3 г/м^3 , начальная влажность 60 %: 1 – начальный радиус капли $r_0=2 \text{ мкм}$, 2 – $r_0=5 \text{ мкм}$

Расчетное падение температуры среды составляет 2-3 градуса, что соответствует результатам измерений с помощью тепловизора. Таким образом, можно говорить о физической адекватности предлагаемой модели испарения капель аэрозоля.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований (№ 12-08-90810-мол_рф_нр, (№ 12-08-90811-мол_рф_нр).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ролдугин В.И. Физико-химия поверхности. Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2008.– 365 с.
2. Б.И. Ворожцов, О.Б. Кудряшова, А.Н. Ишматов, И.Р. Ахмадеев, Г.В. Сакович Взрывная генерация высокодисперсных жидкокапельных аэрозолей и их эволюция // ИФЖ, 2010 – Т. 83, № 6. – С. 1084-2004.

УДК 621.45.042:532.592.2:544.772

СИНТЕЗ ТРИТЕРПЕНОВЫХ МОНОМЕРОВ С АЛЛИЛЬНЫМ ФРАГМЕНТОМ И ПОЛИМЕРНЫХ КОНСТРУКЦИЙ НА ИХ ОСНОВЕ

Г.Ф. Крайнова, И.А. Толмачева, М.Н. Горбунова, В.В. Гришко

На основе бетулина и бетулоновой кислоты осуществлен синтез С-3,С-28 моно- и ди-замещенных сложнэфирных и амидных производных с аллильным фрагментом. На примере сложнэфирных мономеров показана возможность введения полученных мономеров в реакцию радикальной сополимеризации с N-винилпирролидоном, винилацетатом или акрилонитрилом.

Ключевые слова: бетулин, бетулоновая кислота, сложные эфиры, амиды, радикальная сополимеризация, цитотоксичность

Тритерпеноиды растительного происхождения бетулин и бетулиновая кислота активно используются в синтезе новых терапевтически перспективных агентов [1, 2]. Несмотря на проявляемую высокую биологическую активность, использование производных данных тритерпеноидов в практике ограничено ввиду их повышенной гидрофобности. Один из перспективных подходов при решении проблемы – синтез тритерпенсодержащих полимеров, в т.ч. водорастворимых. В настоящее время в литературе представлены лишь единичные примеры направленной химической модификации лупановых тритерпеноидов (бетулоновой кислоты, в частности) с образованием полимерных конструкций, обладающих более высокой фармакологиче-

ской активностью и длительностью действия по сравнению с их низкомолекулярными мономерными составляющими [3]. В настоящей работе описан синтез новых сложнэфирных и амидных тритерпеновых производных с аллильным фрагментом и показана возможность их введения в качестве структурных блоков в полимерные конструкции. При этом в синтезе в качестве исходных соединений нами использованы доступные лупановые тритерпеноиды – бетулин и бетулоновая кислота, а для введения тритерпеновых аллилсодержащих мономеров в полимерные матрицы применен подход, основанный на радикальной сополимеризации в присутствии свободно-радикального инициатора ДАК.