

УЛАВЛИВАНИЕ НАНОАЭРОЗОЛЕЙ ФИЛЬТРАМИ ИЗ НАНОВОЛОКОН

© 2021 г. В. А. Кириш¹, *, А. А. Кириш²

¹Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,
Ленинский проспект, 31, Москва, 119071 Россия

²Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”,
пл. Академика Курчатова, 1, Москва, 123182 Россия

*e-mail: va_kirsch@mail.ru

Поступила в редакцию 28.06.2021 г.

После доработки 07.07.2021 г.

Принята к публикации 09.07.2021 г.

Теоретически исследовано улавливание аэрозольных наночастиц фильтрами из нановолокон. Рассчитано конвективно-диффузионное осаждение точечных частиц из стока потока в модельных фильтрах с упорядоченной структурой с учетом эффекта скольжения газа на волокнах. Показано, что при малых числах Пекле (Pe) диффузионный коэффициент захвата частиц волокном не зависит от числа Кнудсена (Kn) и что при больших числах Пекле ($Pe \gg 1$) коэффициент захвата изменяется от $\eta \sim Pe^{-2/3}$ при $Kn = 0$ до $\eta \sim Pe^{-1/2}$ при $Kn \geq 1$. Установлены области применимости существующих формул для расчета эффективности осаждения наноаэрозолей. По результатам расчетов построены аппроксимационные формулы для коэффициента захвата в интервалах $Pe = 0.1-1000$ и $Kn = 0-1$.

DOI: 10.31857/S0023291221060069

1. ВВЕДЕНИЕ

Тонкая очистка воздуха от взвешенных субмикронных частиц с помощью тонковолокнистых фильтров, начиная с начала 1980-х годов обеспечила развитие высоких технологий. Были установлены стандарты чистоты воздуха и технологических газов и даны рекомендации для выбора соответствующих фильтров. Были разработаны требования к испытаниям фильтров, сводившиеся к необходимости измерения проскока частиц n/n_0 через фильтр при заданной скорости потока в области размеров наиболее проникающих частиц, соответствующих максимуму проскока (минимуму эффективности улавливания). Здесь n_0 и n – концентрация частиц до фильтра и за ним. Для высокоэффективных фильтров из субмикронных волокон максимум проскока обычно соответствует частицам с диаметром от 0.1 до 0.5 мкм при скорости продувки $U = 1-10$ см/с. Поэтому основная задача теории фильтрации состоит в расчете величины проскока наиболее проникающих частиц с радиусом r^* при заданной скорости продувки через фильтр с заданными параметрами: радиусом волокон, пористостью и толщиной слоя фильтрующего материала (фильтра). Частицы с размером, меньшим r^* , из-за интенсивного броуновского движения осаждаются

на волокна более эффективно, чем частицы наиболее проникающего размера, а частицы с радиусом $r > r^*$ лучше задерживаются в фильтре за счет эффекта зацепления, когда, двигаясь по линии тока, проходят на расстоянии от поверхности волокна, меньшем или равным r .

Теория улавливания субмикронных частиц фильтрами, позволяющая рассчитывать радиус частиц r^* и эффективность их осаждения с учетом эффекта скольжения газа на субмикронных волокнах, была развита уже в 1970-х годах. Расчет коэффициента захвата частиц осуществлялся путем суммирования отдельных коэффициентов захвата для разных механизмов осаждения частиц сферической формы [1]. В настоящее время для этого используются численные методы [2]. Отметим, что результаты расчетов эффективности фильтров в области максимума проскока и с учетом неоднородности структуры фильтров удовлетворительно соответствовали экспериментам. Однако для частиц размером порядка десятков нанометров расчетные значения эффективности превышали экспериментальные. Это превышение наблюдалось в основном при малой скорости U для фильтров из полидисперсных волокон, часть которых имела диаметр менее 0.1 мкм. В этом случае существующая теория диффузионного осаждения была не вполне применима, поскольку

была основана на приближении тонкого граничного слоя концентрации частиц на волокне при $Pe \gg 1$, где $Pe = 2aU/D$ – число Пекле, характеризующее диффузионное осаждение частиц с коэффициентом диффузии D из потока со скоростью U на волокно с радиусом a . Однако поскольку главная задача – оценка минимальной эффективности улавливания частиц с радиусом r^* была решена, то эффективное осаждение наночастиц при $r < r^*$ специально не исследовалось. Кроме того, самостоятельное применение тонких слоев нановолокон оказалось ограниченным, поскольку такие слои были непрочными и быстро забивались частицами в процессе эксплуатации. Их обычно использовали в качестве дополнительных к более прочным слоям микронных волокон. Заметим, что для получения очень тонких волокон из различных материалов с диаметром, равным нескольким десяткам нанометров, широкое применение в последние десятилетия получил метод электроспиннинга (электроформования). Этот метод впервые был разработан в лаборатории Н.А. Фукса в НИФХИ им. Л.Я. Карпова еще в 1937 г. [3]. Фильтры из более грубых микронных волокон, получаемых методом электроспиннинга, известные как “фильтры ФП”, широко использовались в СССР для очистки приточного воздуха и выбросов, а также при изготовлении респираторов “Лепесток”.

Простота и доступность электроспиннингового метода получения нановолокон с диаметром в десятки нанометров из различных материалов стимулируют дальнейший поиск путей совершенствования фильтров. Например, нановолокна могут быть использованы в смеси с волокнами микронной толщины при изготовлении бидисперсных фильтров [4] или в виде тонких слоев при изготовлении многослойных фильтров [5]. Для определения оптимальных соотношений микро- и нановолокон требуется развить теорию улавливания частиц нановолокнами с учетом специфики их обтекания, связанной с эффектом скольжения газа на волокнах.

Без учета эффекта скольжения осаждение точечных частиц из поперечного потока на волокно впервые было рассмотрено Натансоном в приближении тонкого граничного слоя концентрации частиц на обтекаемом волокне при $Pe \gg 1$ [6]. Им было аналитически решено уравнение конвективной диффузии в параболическом виде без учета так называемой “продольной диффузии”. Позже, Стечкина уточнила это решение для области промежуточных значений числа Пекле, найдя следующую поправку по Pe к коэффициенту захвата [7]:

$$\eta = 2.9(F/4\pi)^{1/3} Pe^{-2/3} + 0.624Pe^{-1}, \quad (1)$$

где F – безразмерная сила сопротивления волокна на единицу длины. Для плотных фильтров и $Pe < 1$ эта формула неприменима. В этом случае, как впервые было показано в [8], коэффициент захвата в ряду волокон может достигать так называемого геометрического предела. Для отдельного ряда параллельных волокон он равен $\eta = h/a$, где $2h$ – расстояние между осями соседних волокон в ряду. Существованию такого предела было дано объяснение на основе ячеечной модели [9]. При малых числах Пекле, $Pe \ll 1$, следует использовать формулу для коэффициента захвата частиц волокном в ряду, аналитически полученную в [10],

$$\eta = 2\pi Pe^{-1} \left[K_0(Pe/4) + 2 \sum_{m=1}^{\infty} K_0(mPe/2a) \right], \quad (2)$$

где $K_0(z)$ – модифицированная функция Бесселя мнимого аргумента. Формула (2) оказалась в согласии также с экспериментальными данными, полученными при калибровке диффузионных сеточных батарей в области малых Pe в работе [11]. В [12, 13] приводятся результаты численных расчетов коэффициента захвата в широком диапазоне значений Pe , из которых следует, что с увеличением плотности упаковки или с ростом a/h , зависимость коэффициента захвата от Pe стремится к геометрическому пределу при тем меньших Pe , чем плотнее ряд. Отдельный ряд параллельных волокон, расположенных перпендикулярно направлению потока [1] (рис. 1), обычно выбирается в качестве простейшего модельного фильтра, поскольку в нем на поле течения около каждого волокна, как и в реальном фильтре, влияют соседние волокна. При этом наибольшее влияние оказывают волокна, расположенные именно в плоскостях, перпендикулярных направлению потока. Эту специфику поля течения при малых числах Рейнольдса в системах параллельных цилиндров заметили еще в 1950-х годах (см., например, [14]). Аналитическое решение для стокова поля течения в упорядоченном ряду было получено Мияги [15], а для ячеечной модели, эквивалентной гексагональной решетке, решение получил Кувабара [16]. Несколько лет спустя на модельных решетках параллельных волокон с двумерным полем течения [17, 18] было получено экспериментальное подтверждение теории и дано точное решение для гексагональной решетки [19]. С тех пор ряд волокон и гексагональная решетка из параллельных волокон активно используются в теории фильтрации аэрозолей. Отметим, что впервые гексагональную решетку в качестве модели фильтра предложил рассматривать еще Ленгмюр [20], но силы сопротивления волокон он оценивал по формуле Лэмба для силы сопротивления изолированного волокна.

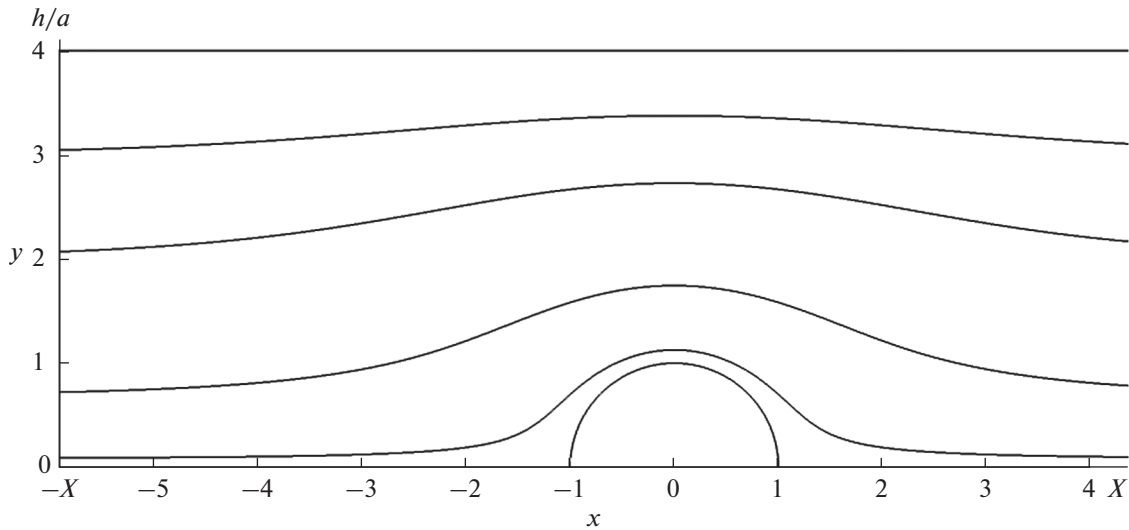


Рис. 1. Линии тока при обтекании волокна поперечным стоковым потоком в расчетной ячейке с $a/h = 0.25$ (отдельный ряд волокон), найденные численным решением уравнений (8) с граничным условием скольжения (10) при $\text{Kn} = 1$.

Влияние скольжения газа на волокнах на перепад давления и эффективность улавливания частиц впервые было рассмотрено Натансоном для изолированного волокна [21] и затем Пихом для ячейечной модели с учетом соседних волокон [22]. Решения для функции тока и силы сопротивления волокна потоку были получены при малых числах Кнудсена, $\text{Kn} \ll 1$, где $\text{Kn} = \lambda/a$, λ – средняя длина свободного пробега молекул воздуха. В этом приближении поправка к силе на эффект скольжения оказалась пропорциональной $\text{Kn}/(1 + \text{Kn})$ [22]. Однако из имеющихся экспериментальных данных для фильтров следовало, что зависимость обратной величины силы от числа Кнудсена имеет линейный характер в широком диапазоне значений Kn , в том числе при $\text{Kn} > 1$, а результаты модельных опытов с разреженными рядами параллельных волокон хорошо согласуются с формулой [1, 23]

$$F^{-1} = F_0^{-1} + (\tau/4\pi) [1 - (2/3)t^2] \text{Kn}, \quad (3)$$

где $F_0 = 4\pi [1/2 - \ln 2t + (1/3)t^2]^{-1}$ – сила сопротивления волокна в ряду при $\text{Kn} = 0$, $t = \pi a/2h$, $\tau = 1.147$ – коэффициент изотермического скольжения, учитывающий взаимодействие молекул воздуха с поверхностью волокна [24]. Экспериментально обнаружена линейность функции $1/F$ была подтверждена с помощью численно-аналитического метода в рамках модели Бхатнагара, Гросса и Крука (БГК) кинетической теории газов в работе [25]. В ней было получено решение для поля скоростей около ультратонкого волокна

в ячейке Кувабары и выведена формула для оценки сил сопротивления волокна, аналогичная формуле (3):

$$F^{-1} = F_0^{-1} + (1/4\pi)(1.27 - 3\alpha) \text{Kn}, \quad (4)$$

где $F_0 = 4\pi (-0.5 \ln \alpha - 0.75 + \alpha + 0.25\alpha^2)^{-1}$, α – плотность упаковки. Отметим, что при сравнении с рядом волокон следует брать значение $\alpha = \pi(a/2h)^2$. Силы, рассчитанные по формулам (3) и (4), хорошо согласуются с экспериментальными данными [1, 26].

2. ОСАЖДЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ НА НАНОВОЛОКНА ПРИ $\text{Kn} > 0$

Рассмотрение эффективности фильтров из нановолокон мы начнем с расчета улавливания наночастиц в точечном приближении при малых Pe , когда частицы осаждаются за счет своей большой диффузионной подвижности и коэффициент захвата превышает единицу. Осаждение наночастиц с учетом эффекта скольжения газа было рассмотрено в ряде работ [1, 22, 27–29]. Впервые для случая, когда кнудсеновский слой тоньше диффузионного, $\text{Kn} \ll (2k_1/\text{Pe})^{1/3} \ll 1$, формула для коэффициента захвата с учетом поправки на скольжение газа на волокне была аналитически выведена Пихом [22]:

$$\eta = 2.9k_1^{-1/3} \text{Pe}^{-2/3} (1 + 0.39k_1^{-1/3} \text{KnPe}^{1/3}), \quad (5)$$

где $k_1 = 4\pi/F$ – гидродинамический фактор. Для учета наблюдаемой в экспериментах линейности

функции $1/F$ гидродинамический фактор удобно представить в виде линейного разложения по Kn , $k_1 = k_0 + \tau Kn$, $k_0 = 4\pi/F_0$ [1]. Из (5) следует, что учет эффекта скольжения на волокнах ведет к увеличению эффективности осаждения. В случае, когда $Kn > (2k_1/Pe)^{1/3}$, как показано в [27], изменяется зависимость коэффициента захвата, $\eta \sim Pe^{-m}$, за счет изменения показателя степени от $m = 2/3$ до $m = 1/2$:

$$\eta = 3.2k_1^{-1/2} (\tau Kn)^{1/2} Pe^{-1/2}. \quad (6)$$

Функциональная зависимость $\eta \sim Pe^{-1/2}$ была подтверждена в [28], где при $Kn \sim 1$ и $Pe \gg 1$ было решено уравнение конвективной диффузии для ячейки Кувабары с плотностью упаковки $\alpha = 1/16$, выбранной в качестве примера. Расчеты были выполнены на основе поля течения для промежуточных чисел Кнудсена, найденного ранее методами кинетической теории газов (решением уравнения Больцмана в БГК-приближении) [25]. Рассчитанный в [28] коэффициент захвата аппроксимируем в интервале $Kn = 0.1-1$ следующей функцией:

$$\eta = 2.316 [1 + 0.11/(\tau Kn)]^{-1} Pe^{-1/2}. \quad (7)$$

Особо отметим, что все известные аналитические результаты с учетом эффекта скольжения газа были получены в пределе больших чисел Пекле, для рыхлых упаковок волокон и для случая небольшого коэффициента захвата. Однако при осаждении наночастиц на нановолокно в режиме тонкой фильтрации, когда скорость потока составляет порядка нескольких см/с, число Пекле имеет промежуточные значения $Pe \sim 1$. При этом диффузионный и кнудсеновский слои будут не малы и соизмеримы по величине. Такой случай может быть исследован только численным моделированием.

Расчет полей течения и концентрации частиц при обтекании ряда волокон стоковым потоком с учетом скольжения газа

Поля скоростей и концентрации наночастиц при поперечном обтекании ряда параллельных волокон находим численным решением стационарных уравнений Стокса [30]

$$\nabla p = \Delta \mathbf{u}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (8)$$

и конвективной диффузии [31]

$$2Pe^{-1} \Delta n - \mathbf{u} \cdot \nabla n = 0, \quad (9)$$

где \mathbf{u} – вектор скорости потока, p – давление, n – концентрация, Δ – лапласиан, ∇ – оператор набла. Здесь все переменные приведены к безразмерному виду с использованием характерных мас-

штабов длины и скорости – радиуса волокна a и скорости набегающего потока U . Концентрация нормирована на входную концентрацию n_0 . В качестве граничных условий на поверхности волокон ставились условия прилипания $\mathbf{u} = 0$ (при $Kn = 0$) и скольжения [22] (при $Kn > 0$),

$$u_r = 0, \quad u_\theta = \tau Kn \sigma_{r\theta}, \quad (10)$$

где $\sigma_{r\theta}$ – касательное напряжение. Для концентрации ставилось условие поглощения частиц $n = 0$. На входной границе, при $x = -X$, были выбраны условие невозмущенной скорости $\mathbf{u} = 1$ и условие однородной концентрации $n = 1$, при $x = X$ – условия отсутствия вязких напряжений, нулевого давления $p = 0$ и выравнивания концентрации. На верхней и нижней границах ячейки ставились условия симметрии для компонент скорости и концентрации. Расчетная ячейка показана на рис. 1. Метод численного решения задачи изложен в [32]. Безразмерная сила сопротивления единицы длины волокна была найдена интегрированием по поверхности волокна проекции локального потока импульса на направление потока газа:

$$F = \int_S T_x dS, \quad (11)$$

где поток импульса равен $\mathbf{T} = (-p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}') \mathbf{n}$ [30], $\boldsymbol{\sigma}'$ – тензор вязких напряжений, \mathbf{I} – единичный тензор, \mathbf{n} – вектор внешней нормали к поверхности, dS – элемент поверхности. Коэффициент захвата рассчитывался по формуле

$$\eta = \int_S j_N dS, \quad (12)$$

где $j_N = 2Pe^{-1} \partial n / \partial r$ – нормальная компонента плотности диффузионного потока частиц на поверхности волокна при $r = 1$, $dS = d\theta$, r и θ – безразмерные полярные координаты.

Результаты расчета коэффициента захвата частиц в отдельном ряду волокон

На рис. 2 приводятся результаты расчета коэффициентов захвата точечных частиц волокном в отдельном ряду (кривые 1) и в эквивалентной по плотности упаковки ячейке Кувабары (2–5) с учетом эффекта скольжения газа на волокнах при $Kn = 0.3$ (рис. 2а) и $Kn = 1$ (рис. 2б). Кривые 1 получены на основе численного решения уравнений (8), (9) с граничным условием скольжения (10); кривые 2 рассчитаны для поля течения работы [25] в ячейке Кувабары с $\alpha = 1/16$; прямые 3 рассчитаны для больших Pe и промежуточных Kn по аппроксимационной формуле (7) (по данным [28]);

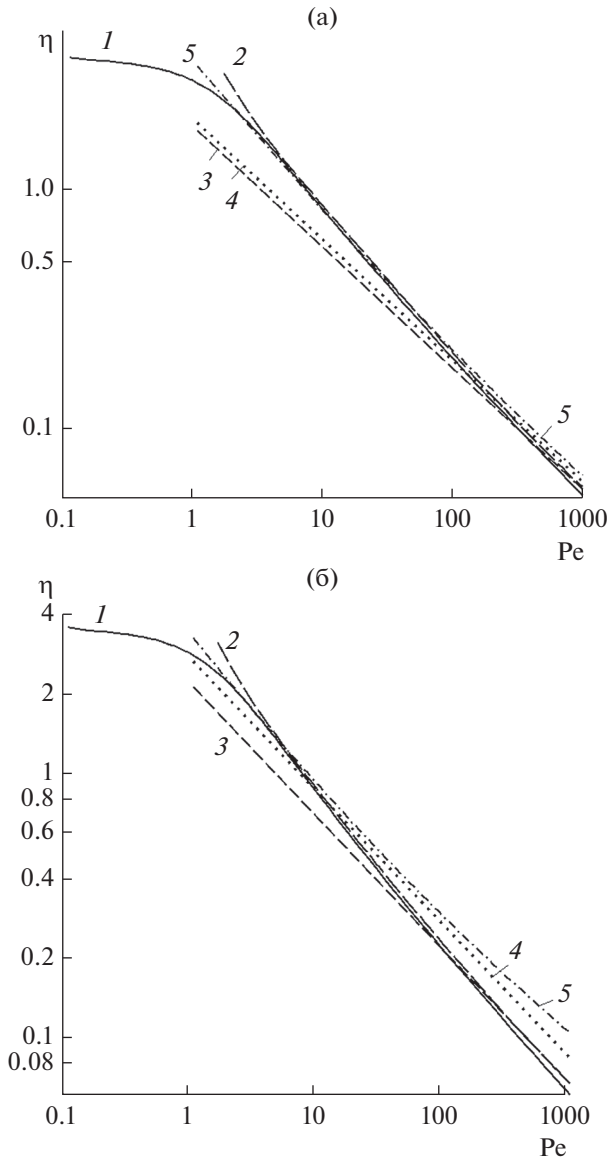


Рис. 2. Зависимости диффузионного коэффициента захвата от числа Пекле волокном в ряду (1) и в ячейке Кувабары (2–5) при $Kn = 0.3$ (а) и $Kn = 1$ (б). 1 – расчет на основе численного решения уравнений (8), (9) с граничным условием скольжения (10); 2 – то же для ячейки с полем течения, полученным методами кинетической теории газов для промежуточных Kn в работах [25, 28]; 3 – расчет по формуле (7) для больших Pe и промежуточных Kn (по данным [28]); 4 – расчет по формуле (6); 5 – расчет по (5); $\alpha = 1/16$.

прямые 4 и 5 построены по формулам (6) и (5) соответственно.

Из рис. 2 следует, что значения η , рассчитанные по аналитическим формулам, полученным для $Pe \gg 1$, удовлетворительно согласуются с данными численного моделирования η при небольших числах Кнудсена ($Kn = 0.3$) и существенно превышают их при $Kn = 1$. При этом еще раз от-

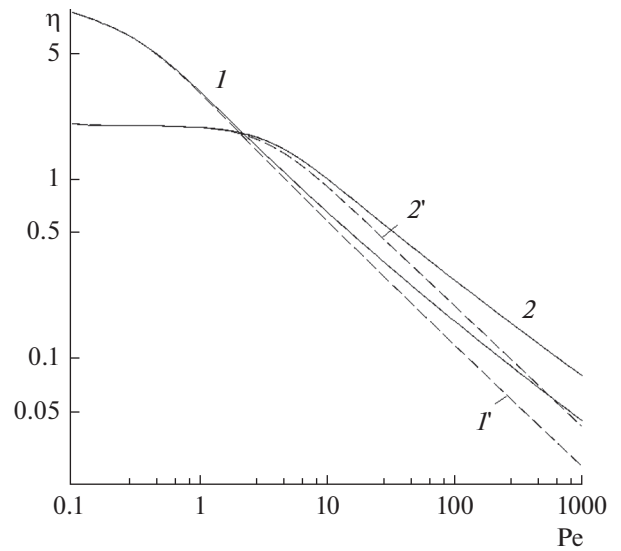


Рис. 3. Зависимости диффузионного коэффициента захвата точечных частиц волокном в рядах с разным шагом и разным значением числа Кнудсена от числа Пекле: $a/h = 0.2$ (1, 1') и $a/h = 0.5$ (2, 2') при $Kn = 1$ (1, 2) и $Kn = 0$ (1', 2').

метим, что в случае больших чисел Пекле коэффициент захвата изменяется от $\eta \sim Pe^{-2/3}$ при $Kn = 0$ до $\eta \sim Pe^{-1/2}$ при $Kn \geq 1$.

На рис. 3 представлены зависимости диффузионного коэффициента захвата от числа Пекле в рядах волокон с разным шагом и разным значением числа Кнудсена: $a/h = 0.2$ (кривые 1, 1') и $a/h = 0.5$ (кривые 2, 2') при $Kn = 1$ (1, 2) и $Kn = 0$ (1', 2'). Из рис. 3 следует, что, во-первых, рост коэффициента захвата замедляется с уменьшением Pe при тем большем Pe , чем плотнее ряд, и, во-вторых, в области малых Pe коэффициент захвата не зависит от числа Кнудсена. Показано также, что в области больших чисел Пекле зависимость коэффициента захвата от Pe существенно возрастает с ростом Kn для рядов с большим и малым расстоянием между волокнами в ряду. Это же увеличение η наглядно демонстрируется на рис. 4 для ряда волокон с $a/h = 0.2$, где показаны зависимости диффузионного коэффициента захвата частиц волокном от числа Пекле при разных значениях чисел Кнудсена: $Kn = 0$ (1), 0.1 (2), 0.5 (3), 1 (4).

На рис. 5 дается сравнение существующих теоретических оценок коэффициента захвата при разных Pe в зависимости от Kn . Здесь представлены значения коэффициента захвата наночастиц волокном в ряду и волокном в эквивалентной по плотности упаковки ячейке Кувабары с $\alpha = 1/16$. Кривые 1 рассчитаны по формуле (7),

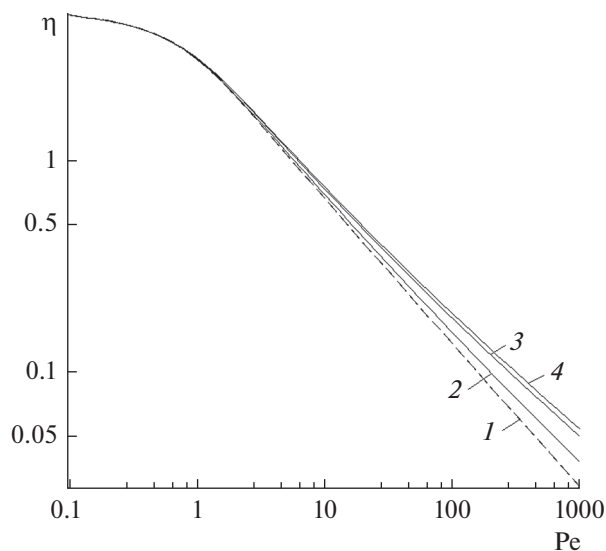


Рис. 4. Зависимости диффузионного коэффициента захвата частиц волокном в ряду с $a/h = 0.2$ от числа Пекле при разных значениях чисел Кнудсена: $Kn = 0$ (1), 0.1 (2), 0.5 (3), 1 (4).

кривые 2 – по формуле (5), кривые 3 – по формуле (6), кривые 4 построены на основе численного решения уравнений (8), (9) с условием скольжения (10). Видно, что при $Pe \gg 1$ и $Kn \geq 1$ расчеты по формулам (5) и (6) дают сильно завышенные результаты. Хорошее согласие наблюдается только в области $Kn = 0.2-0.3$ для $Pe = 1000$ и $Kn = 0.4-0.5$ для $Pe = 100$, что указывает на применимость этих формул при расчете коэффициента захвата при малых числах Пекле. Видно, что в случае больших коэффициентов захвата $\eta \geq 1$, соответствующих малым Pe , скольжение не влияет на η и что при $Kn \geq 1$ результаты расчетов η по (5) и (6) довольно близки. По этим результатам были построены аналитические аппроксимации для коэффициентов захвата наночастиц волокном в отдельном ряду (см. Приложение).

Результаты расчета коэффициента захвата частиц в модельном фильтре, состоящем из нескольких рядов волокон

Предельное значение Pe , ниже которого отсутствует взаимное влияние соседних параллельных рядов волокон на коэффициент захвата, можно определить для плоского течения по формуле Эйнштейна $h^2 = 2Dt$, где $2h$ – расстояние между осями волокон в ряду. Разделив обе части формулы на радиус волокна, и учитывая, что средняя скорость течения равна $U = h/t$, находим, что $h/a = 4/Pe$, откуда следует, что в диапазоне плотности упаковки системы рядов волокон, соответ-

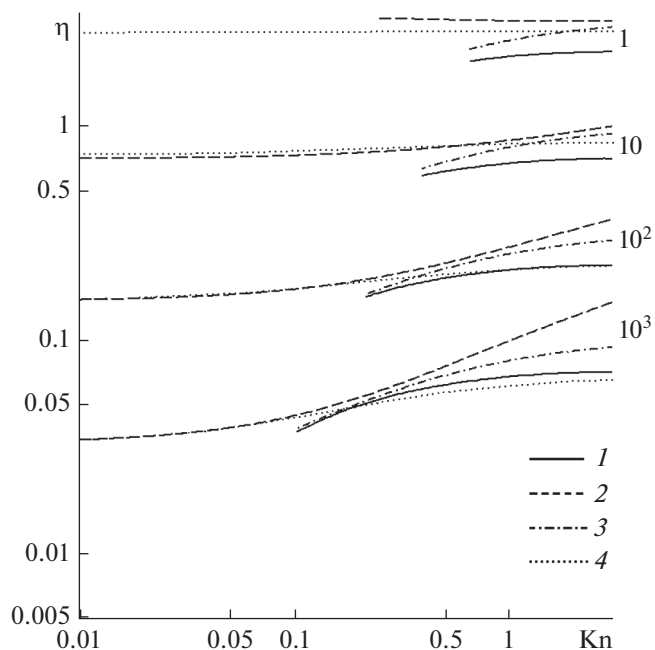


Рис. 5. Рассчитанные зависимости коэффициента захвата наночастиц волокном в ряду от числа Кнудсена при разных значениях Pe (указаны у кривых) при $\alpha = 1/16$: 1 – по формуле (7) для промежуточных Kn и больших Pe (по данным [28]), 2 – по формуле (5), 3 – по (6), 4 – в ряду волокон, численное решение уравнений (8), (9) с условием скольжения (10).

ствующей плотности упаковки реальных фильтров ($a/h = 0.2-0.3$), ряды не должны оказывать взаимного влияния на осаждение частиц при $Pe < 1$. В этом случае, если коэффициент захвата $\eta > 1$, но меньше предельного, проскок частиц через систему из N рядов можно примерно оценивать по формуле

$$n/n_0 = [1 - (a/h)\eta]^N, \quad (13)$$

где η – коэффициент захвата частиц волокном в ряду. Отметим, что при $\eta > 1$ не выполняется экспоненциальная зависимость проскока частиц по всей толщине фильтра из N слоев, и расчет η по известной формуле для проскока частиц

$$n/n_0 = \exp[-N(a/h)\eta] \quad (14)$$

дает существенно завышенный результат.

В табл. 1 представлены результаты прямого моделирования коэффициентов захвата с использованием уравнений (8)–(10) в зависимости от Pe для гексагональной решетки из восьми параллельных рядов волокон с $a/h = 0.25$ и для одного ряда при разных значениях Kn . Видно, что коэффициенты захвата практически полностью совпадают при всех значениях Pe и Kn и что при $Pe < 10$ значения коэффициента захвата наноча-

Таблица 1. Значения коэффициента захвата η наночастиц волокнами в гексагональной решетке и в ряду (в скобках) параллельных волокон при разных значениях чисел Кнудсена и Пекле; $a/h = 0.25$

| Значение K_n | Значение Pe | | | | | | |
|----------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| | 0.1 | 0.5 | 1 | 5 | 10 | 100 | 1000 |
| $K_n = 0$ | 3.136 (3.896) | 3.123 (3.425) | 2.871 (2.857) | 1.263 (1.144) | 0.795 (0.709) | 0.141 (0.147) | 0.029 (0.031) |
| $K_n = 0.5$ | 3.133 (3.897) | 3.123 (3.441) | 2.907 (2.897) | 1.353 (1.217) | 0.886 (0.782) | 0.182 (0.194) | 0.046 (0.054) |
| $K_n = 1$ | 3.139 (3.897) | 3.173 (3.445) | 2.915 (2.906) | 1.374 (1.234) | 0.907 (0.799) | 0.190 (0.205) | 0.049 (0.058) |

стиц в многослойной гексагональной модели уже при $Pe < 1$ не изменяются с Pe .

Сравнение с экспериментом

Приведенное ранее сравнение теоретических и экспериментальных данных для коэффициентов захвата, полученных с диффузионными батареями, состоящими из наборов сеток с упорядоченным расположением волокон [11], показывает их удовлетворительное согласие. При этом показано, что в области $Pe < 1$ коэффициент захвата в последующих слоях уменьшается. Эти данные получены без учета эффекта скольжения, поскольку числа Кнудсена для сеток малы, $K_n \ll 1$. Эксперименты при $K_n \sim 1$ с модельными тонковолокнистыми фильтрами с известными структурой и полем течения еще не проведены, хотя уже появляются сообщения, в которых измеряется проскок наночастиц через слои нановолокон (но их параметры не приводятся). Однако для сравнения с расчетами проскока частиц нужны экспериментальные данные для фильтров с известной плотностью упаковки и, желательно, бездефектных и с однородной структурой. К таким фильтрам относятся слои из нановолокон, получаемых методом электроспиннинга, когда заряды, имеющиеся на волокнах в момент их формирования, препятствуют их слипанию в образующемся слое [33]. Именно для таких фильтров приводятся данные об эффективности и перепаде давления в недавней работе [34], где фильтры с одинаковой толщиной $H = 5.1$ мкм и с одинаковой плотностью упаковки $\alpha = 0.052$ состояли из волокон диаметром 100, 200 и 300 нм. Проскок наночастиц измерялся при скорости 1.67 см/с, что соответствует $Pe < 1$. Измеренные в работе [34] значения перепада давления Δp и расчетные значения гидродинамического фактора $k = 4\pi/F$ даны в табл. 2, где F была найдена по формуле $\Delta p = FLU\mu$. Здесь $L = \alpha H / \pi a^2$ – длина волокон на единице площади фильтра. Значения силы сопротивления были рассчитаны по формуле для веерной модели с учетом эффекта скольжения (без учета которого ошибка в оценке силы сопротивления нановолокон достигает 100%):

$$F^f = 4\pi / (-0.5 \ln \alpha - 0.52 + 0.64\alpha + 1.43(1 - \alpha)K_n). \tag{15}$$

Из табл. 2 видно, что расчеты перепада давления по этой формуле хорошо согласуются с экспериментальными данными для фильтров из волокон, полученных электроспиннингом (значения фактора неоднородности структуры фильтров $\delta = F^f / F^r$ примерно равны единице). Это сам по себе интересный результат, хотя авторы интерпретировали его неверно, поскольку не учли влияние эффекта скольжения.

В табл. 3 представлены данные об осаждении частиц с диаметром $2a = 30$ нм ($D = 6.14 \times 10^{-5}$ см²/с), что при столь малой скорости потока соответствует $Pe < 1$. (Сравнения с осаждением более крупных частиц мы не даем, поскольку их нельзя рассматривать как точечные). Отметим, что в работе [34] перед измерением проскока частиц через фильтры заряды на волокнах нейтрализовались.

Значения проскока n/n_0 для фильтров из волокон с $2a = 200$ нм и $2a = 300$ нм взяты из рис. 8 работы [34]. Значения n/n_0 для фильтров из волокон с $2a = 100$ нм были пересчитаны из данных рис. 9 этой работы, где приведен критерий качества фильтра при улавливании наночастиц с $2r_p = 30$ нм, который авторы определили как

Таблица 2. Экспериментальные данные о сопротивлении фильтров из нановолокон (рис. 7 в [34]): $U = 5$ см/с, $H = 5.1$ мкм, $\alpha = 0.052$

| Параметр | Марка фильтра | | |
|------------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| | filter “100” | filter “201” | filter “306” |
| $2a$, нм | 100 | 201 | 306 |
| Δp , Па | 167 | 55 | 22 |
| K_n | 1.3 | 0.65 | 0.43 |
| L , см ⁻¹ | 3.38×10^5 | 8.36×10^4 | 3.61×10^4 |
| F^r | 5.38 | 7.16 | 6.63 |
| F^f | 4.56 | 6.73 | 8.02 |
| δ | 0.85 | 0.94 | 1.21 |

Таблица 3. Экспериментальные (η) [34] и расчетные (η^*) значения коэффициента захвата для фильтров из нановолокон; $D = 6.14 \times 10^{-5}$ см²/с, $U = 1.67$ см/с

| $2a$, нм | Kn | $(n/n_0)_{\text{exp}}$ | Pe | η | η^* |
|-----------|------|------------------------|-------|--------|----------|
| 100 | 1.3 | 2.3×10^{-4} | 0.275 | 2.20 | 3.06 |
| 200 | 0.65 | 0.02 | 0.55 | 2.10 | 2.85 |
| 300 | 0.43 | 0.14 | 0.825 | 1.70 | 2.15 |

$q = -\ln(n/n_0)/(\Delta p/U) = 0.40$. Значение $\Delta p/U$ находим из рис. 7 в [34], где дано, что $\Delta p = 100$ Па при $U = 3$ см/с, откуда получаем, что $-\ln(n/n_0) = 13.3$, т.е. $n/n_0 = 1.7 \times 10^{-6}$ (такие значения проскока упоминаются в тексте [34]). Поскольку $Pe < 1$, а число слоев волокон в фильтре мало, то для оценки η мы можем воспользоваться формулой (13). Учитывая, что $\alpha \approx (a/h)^2$, определим число слоев для каждого фильтра, равное $N = H/2h = H\alpha^{1/2}/2a$, откуда получаем, что $N_1 \cong 12$, $N_2 \cong 6$, $N_3 \cong 4$. Соответствующие экспериментальные значения η представлены в табл. 3. Видно, что они превышают единицу, но заметно меньше расчетных значений η^* . Небольшие микронеоднородности реального фильтра не сказываются заметно на перепаде давления, но влияют на распределении частиц за каждым слоем волокон и, тем самым, заметно влияют на η . Здесь важно отметить, что экспериментальные данные в области $Pe < 1$ подтверждают слабое увеличение η с уменьшением Pe .

В заключение отметим, что при изготовлении фильтров из смеси микронных волокон и нановолокон роль нановолокон в бидисперсных фильтрах должна быть определяющей. Это следует из результата работы [35], где было показано, что при малых числах Рейнольдса, $Re \ll 1$, диффузионный коэффициент захвата для тонких волокон в ряду много больше, чем для толстых волокон.

3. ВЫВОДЫ

Расчитано осаждение наночастиц из стокового (ползущего) потока в модельном фильтре из монодисперсных нановолокон, перпендикулярных потоку, с учетом эффекта скольжения газа на волокнах. На основе численного решения уравнений Стокса с граничным условием скольжения на волокнах найдены поле скоростей газа вблизи нановолокон и сила сопротивления волокон потоку в фильтрах с упорядоченной структурой и с пористостью, соответствующей пористости реальных фильтров. Показано, что расчетные значения скорости потока при промежуточных числах Кнудсена, в отличие от силы сопротивления во-

локна, близки к данным расчетов в рамках более строго подхода в рамках кинетической теории газов, основанного на решении уравнения Больцмана в БГК-приближении [25, 28]. Это совпадение позволило использовать полученное стоковое поле течения со скольжением для расчета осаждения частиц. При этом формула для силы гидродинамического сопротивления нановолокон при промежуточных числах Кнудсена была получена линейной экстраполяцией значений F , рассчитанных в континуальном приближении с граничным условием скольжения газа (следуя подходу, предложенному в [1]). На основе полученного поля течения рассчитано осаждение точечных частиц на нановолокна при числах Пекле $Pe = 0.1-1000$ в интервале чисел Кнудсена $Kn = 0-1$. Показано, что с ростом числа Кнудсена изменяется зависимость диффузионного коэффициента захвата частиц волокном от числа Пекле $\eta \sim Pe^{-m}$ (показатель степени изменяется от $m = 2/3$ при $Kn = 0$ до $m = 1/2$ при $Kn \geq 1$). По результатам расчетов построены аппроксимационные формулы для коэффициента захвата в зависимости от Pe и Kn для разных значений a/h . Показано, что в области малых чисел Пекле ($Pe \leq 1$) коэффициент захвата практически не зависит от Kn , а при $Pe \sim 1$ близок к оценкам по существующим аналитическим формулам.

Совместный учет собственного размера частиц (эффекта зацепления), их инерции, влияния ван-дер-ваальсовых сил и эффекта скольжения газа на осаждение неточечных частиц на нановолокна, а также оценки величины радиуса наиболее проникающих частиц r^* будут даны в следующих сообщениях.

ПРИЛОЖЕНИЕ

По результатам численного моделирования осаждения точечных наночастиц из поперечного стокового потока со скольжением в ряду параллельных волокон построены многопараметрические аппроксимации для коэффициента захвата частиц волокном в зависимости от Pe , Kn , и a/h .

Приведем в качестве примера аппроксимационные формулы, применимые в широком интервале значений числа Пекле, $Pe = 0.1-1000$, для $a/h = 0.2$ и двух значений числа Кнудсена.

Для $Kn = 0$

$$\eta = 5.0756 - 2.7986Pe \exp(-0.2997Pe)$$

в интервале $Pe = 0.1-1$,

$$\eta = 1.1174 - 5.8085Pe^{-1/3} + 12.841Pe^{-2/3} - 5.1377Pe^{-1}, \quad Pe = 1-10,$$

$$\eta = 2.8462\text{Pe}^{-2/3} + 0.5673\text{Pe}^{-1},$$

$$\text{Pe} = 10\text{--}1000.$$

Для $\text{Kn} = 1$

$$\eta = 5.0669 - 2.713\text{Pe} \exp(-0.3026\text{Pe})$$

в интервале $\text{Pe} = 0.1\text{--}1$,

$$\eta = 1.1183 - 5.4753\text{Pe}^{-1/3} + 12.4719\text{Pe}^{-2/3} -$$

$$- 5.0436\text{Pe}^{-1}, \quad \text{Pe} = 1\text{--}10,$$

$$\eta = 1.6646\text{Pe}^{-1/2} + 2.335\text{Pe}^{-1},$$

$$\text{Pe} = 10\text{--}1000.$$

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа поддержана НИЦ “Курчатовский институт”
(приказ № 1807 от 14.08.2019).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kirsch A.A., Stechkina I.B.* // Fundamentals of Aerosol Science / Ed. by Shaw D.T. N.Y.: Wiley-Interscience, 1978. Ch. 4. P. 165.
2. *Advances in Aerosol Filtration* // Spurny K.R., Ed. Boca Raton: CRC Press, 1998.
3. *Фукс Н.А.* // Химическая промышленность. 1978. № 11. С. 688.
4. *Choi H.Y., Kumita M., Seto T., Inui Y., Bao L., Fujimoto T., Otani Y.* // J. Aerosol Sci. 2017. V. 114. P. 244.
5. *Leong W.W-F.* // Aerosol Sci. Technol. 2009. V. 43. P. 1174.
6. *Натансон Г.Л.* // Докл. АН СССР. 1957. Т. 112. С. 100.
7. *Стечкина И.Б.* // Докл. АН СССР. 1966. Т. 167. С. 1327.
8. *Kirsch A.A., Chechuev P.V.* // Aerosol Sci. Technol. 1985. V. 4. P. 11.
9. *Roldughin V.I., Kirsch A.A.* // J. Aerosol Sci. 1995. Suppl. 1. V. 26. P. 731.
10. *Черняков А.Л., Кириш А.А., Ролдугин В.И., Стечкина И.Б.* // Коллоид. журн. 2000. Т. 62. С. 547.
11. *Кириш В.А., Кириш А.А.* // Коллоид. журн. 2020. Т. 82. С. 432.
12. *Kirsch V.A., Kirsch A.A.* // Aerosols – Science and Technology. Ed. by *Agranovski I.* Weinheim: Wiley-VCH, 2010. P. 283.
13. *Кириш В.А.* // Журн. физ. хим. 2005. Т. 79. С. 2292.
14. *Fujikawa H.* // J. Phys. Soc. Jpn. 1956. V. 11. P. 558.
15. *Miyagi T.* // J. Phys. Soc. Jpn. 1959. V. 13. P. 493.
16. *Kuwabara S.* // J. Phys. Soc. Jpn. 1959. V. 14. P. 527.
17. *Kirsch A.A., Fuchs N.A.* // Ann. Occup. Hyg. 1967. V. 10. P. 7.
18. *Kirsch A.A., Fuchs N.A.* // J. Phys. Soc. Jpn. 1967. V. 22. P. 1251.
19. *Головин А.М., Лопатин В.А.* // ПМТФ. 1969. № 2. С. 99.
20. *Langmuir I.* // Report on Smokes and Filters. Section I. U.S. Office of Scientific Research and Development. 1942. no. 865. Pt. IV.
21. *Натансон Г.Л.* // Коллоид. журн. 1962. Т. 26. С. 52.
22. *Pich J.* // Ann. Occup. Hyg. 1966. V. 9. P. 23.
23. *Kirsch A.A., Stechkina I.B., Fuchs N.A.* // J. Colloid Interface Sci. 1971. V. 37. P. 458.
24. *Albertoni S., Cercignani C., Gotusso L.* // Phys. Fluids. 1963. V. 6. P. 993.
25. *Ролдугин В.И., Кириш А.А., Емельяненко А.М.* // Коллоид. журн. 1999. Т. 61. С. 530.
26. *Kirsch A.A., Stechkina I.B., Fuchs N.A.* // J. Aerosol Sci. 1973. V. 4. P. 287.
27. *Chmielewski R.D., Goren S.L.* // Environ. Sci. Technol. 1972. V. 6. P. 1101.
28. *Ролдугин В.И., Кириш А.А.* // Коллоид. журн. 2001. Т. 63. С. 679.
29. *Кириш В.А.* // Коллоид. журн. 2004. Т. 66. С. 352.
30. *Ландау Л.Д., Лифшиц И.М.* Теоретическая физика. Т. 6. Гидродинамика. Издание 4-е, М.: Наука, 1988.
31. *Левич В.Г.* Физико-химическая гидродинамика. М.: ГИФМЛ, 1959.
32. *Кириш В.А.* // Коллоид. журн. 2003. Т. 65. С. 795.
33. *Ушакова Е.Н., Козлов В.И., Петрянов И.В.* // Коллоид. журн. 1973. Т. 35. С. 388.
34. *Kim H.B., Lee W.J., Choi S.C., Lee K.E., Lee M.N.* // Aerosol Sci. Technol. 2021. V. 55. P. 154.
35. *Kirsch A.A., Stechkina I.B.* // J. Colloid Interface Sci. 1973. V. 43. P. 10.