

## Моделирование движения мелких твердых заряженных частиц в вязкой несжимаемой среде под действием гравитационного и электрического полей

Владимир Фенченко

К. ф.-м. н, с. н. с., Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАНУ, пр. Ленина, 47, Харьков, 61103, e-mail: fenchenco@ukr.net

*Предложен метод численного решения системы уравнений Навье-Стокса-Пуассона-Фоккера-Планка, описывающий нестационарное течение взвеси мелких твердых заряженных частиц в вязкой несжимаемой среде. Метод основан на схеме расщепления по физическим факторам для уравнения движения несущей среды и использовании статистического моделирования для решения уравнения Фоккера-Планка для функции распределения частиц. Выполнено численное моделирование процесса разделения по характерным радиусам микрочастиц измельченного нитрида бора под действием гравитационной и кулоновской сил.*

**Ключевые слова:** мелкие частицы, электрический заряд, вязкая среда, моделирование, численные методы.

**Вступление.** В современных промышленных технологиях в химической, пищевой, фармацевтической, металлургической и других отраслях все большее применение находят различные мелкодисперсные порошковые материалы. В процессе их производства при дроблении исходного сырья получаемые частицы приобретают за счет электрокинетических явлений тот или иной электрический заряд и имеют значительный разброс по размерам.

Моделирование движения таких частиц в газе или жидкости, необходимое для разработки новых и совершенствования имеющихся технологий, сопряжено со значительными трудностями, а имеющиеся методики носят, в основном, ориентировочный характер и не позволяют учесть все значимые факторы, влияющие на движение частиц.

Так как скорости разных частиц будут сильно отличаться, то для описания их движения необходимо использовать функцию распределения частиц в пространстве по размерам и скоростям. Эта функция удовлетворяет уравнению Власова или Фоккера-Планка, если на частицы действуют дополнительные силы случайного характера. Для расчета электрического поля используется уравнение Пуассона, а уравнение движения в системе Навье-Стокса должно быть дополнено интегральным членом, учитывающим влияние частиц на движение несущей среды [1].

В работе [2] предложен метод численного решения начально-краевой задачи, описывающей нестационарные движения электрически нейтральных микрочастиц,

основанный на схеме расщепления по физическим факторам для уравнения движения несущей среды и использовании метода статистического моделирования для решения уравнения Власова (Фоккера-Планка) для функции распределения. Этот метод был распространен [3, 4] на случай, когда частицы несут электрический заряд и, следовательно, появляются дополнительные кулоновские силы их взаимодействия между собой. К сожалению, метод был сложен в реализации и предполагал использование значительных вычислительных мощностей.

Однако в зависимости от размеров частиц и моделируемого технологического процесса соотношение и характер сил, действующих на частицы со стороны несущей среды, электрического и гравитационного полей меняется в широких пределах. Соответственно подходы к моделированию движения таких частиц имеют свои особенности, которые рассмотрены в данной работе.

### 1. Уравнения, граничные и начальные условия

Со стороны несущей среды на частицы действуют сила Стокса, Архимеда, присоединенных масс и Бассе-Бусинеска. Для микрочастиц сила присоединенных масс, пропорциональная объему, и Бассе-Бусинеска, пропорциональная поверхности частицы, и возникающие только при ускоренном движении частиц, могут не учитываться. Если плотность частиц намного больше плотности несущей среды, то может не учитываться и сила Архимеда, пропорциональная объему частицы и значительно меньшая в этом случае, чем гравитационная сила. Таким образом, сила вязкого сопротивления Стокса, пропорциональная радиусу частицы, является основной силой, действующей на частицу со стороны несущей среды

$$\vec{f}_p^s = 6\pi r_p \mu [\vec{u} - \vec{w}_p],$$

где  $\vec{u} = \vec{u}(\vec{x}, t)$  — поле скоростей несущей среды;  $\mu$  — ее динамическая вязкость;  $r_p$  — характерный радиус частицы;  $\vec{x}_p$  — ее координата;  $\vec{w}_p$  — скорость.

Со стороны электрического поля на частицы действует сила Кулона и диэлектрофоретическая (пондеромоторная) сила. Диэлектрофоретическая сила пропорциональна объему частицы и определяется неравномерностью электрического поля. Она обычно значительно меньше силы Кулона и, кроме того, время поляризации частиц при их низкой проводимости  $\tau \approx (\epsilon\epsilon_0)/\sigma$ , где  $\sigma$  — проводимость, как правило, значительно больше времени пребывания частиц в аппаратах электронно-ионной технологии. Поэтому сила Кулона, пропорциональная заряду частицы, является основной силой, действующей на частицу со стороны электрического поля

$$\vec{f}_p^q = -q_p \nabla \varphi,$$

где  $\varphi = \varphi(\vec{x}, t)$  — потенциал поля;  $q_p = q_p(r_p)$  — заряд частицы.

Заряд микрочастицы приобретают в процессе дробления сырья в основном за счет электрокинетических явлений, а также в аппаратах электронно-ионной технологии из-за того, что движущиеся ионы сталкиваются с частицей и осаждаются на ее поверхности. Для наиболее крупных частиц при выполнении условия  $D|\nabla n| \ll m\eta E$ , где  $D$  — коэффициент диффузии;  $E$  — электрическое поле;  $n, \eta$  — концентрация и подвижность ионов, зарядка осуществляется за счет оседания на поверхности частицы движущихся под действием электрического поля ионов. Поле у поверхности такой частицы определяется внешним полем, полем поляризации частицы и полем осевших зарядов. Неравномерное распределение заряда на поверхности приводит к беспорядочному вращению частицы из-за опрокидывающего действия электростатических сил и благодаря этому избыточный заряд распределяется по поверхности частицы равномерно, а зарядка продолжается пока электрическое поле у поверхности частицы не станет близким к нулю. Частица при этом получит заряд пропорциональный ее поверхности [5]. Для наиболее мелких частиц при выполнении условия  $D|\nabla n| \gg m\eta E$  полученный таким образом заряд оказывается слишком малым и накопление заряда будет продолжаться до тех пор пока у основной массы ионов кинетическая энергия будет достаточной для преодоления потенциальной энергии их взаимодействия с частицей [6], заряд частицы в этом случае, в конечном счете, будет пропорциональным радиусу частицы.

Для условий, наблюдаемых в аппаратах электронно-ионной технологии при размерах частиц менее 0,1 мкм, основным является адсорбционно-диффузный механизм зарядки, а так называемая «ударная» зарядка преобладает в этих условиях для частиц размером более 1 мкм. В промежуточном диапазоне обычно величину заряда можно вычислять как сумму зарядов, рассчитанных по формулам «ударной» и «диффузионной» зарядки [7, 8]

$$q_p \approx 4\pi\epsilon_0 r_p \left[ \frac{W}{e} + \left( 1 + 2 \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \right) |\nabla\phi| r_p \right],$$

где  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость частиц;  $W$  — кинетическая энергия, а  $e$  — заряд ионов.

Заметим, что время зарядки микрочастиц не превышает долей секунды, а время разрядки значительно превышает время нахождения частиц в аппаратах электронно-ионной технологии, так что заряд частицы во время ее движения практически не меняется.

Кроме сил Стокса и Кулона на микрочастицы действует также гравитационная сила, которая пропорциональна объему частицы

$$\vec{f}_p^g = m_p \vec{g},$$

где  $m_p = \frac{4}{3}\pi r_p^3 \rho_p$  — масса частицы;  $\rho_p$  — ее плотность.

Запишем уравнение Ланжевена движения микрочастицы под действием сил Стокса, Кулона и гравитационной силы

$$m_p \frac{d^2 \bar{x}_p}{dt^2} = 6\pi\mu r_p \left[ \bar{u} - \frac{d\bar{x}_p}{dt} \right] - q(r_p) \nabla\phi + m_p \left[ \bar{g} + \bar{\xi} \right],$$

где  $\bar{\xi} = \bar{\xi}(t)$  — случайная функция от времени,  $\langle \bar{\xi}_i(t) \rangle = 0$  (угловыми скобками обозначено усреднение по времени),  $\langle \bar{\xi}_i(t), \bar{\xi}_i(t + \tau) \rangle = 2D\delta(\tau)$ ,  $D$  — коэффициент диффузии и соответствующее уравнение Фоккера-Планка относительно функции  $f = f(\bar{x}, \bar{w}, r, t)$  распределения частиц в пространстве по радиусам и скоростям

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\bar{w}, \nabla_x) f + \left( \nabla_w, \left[ \frac{9\mu}{2r^2} [\bar{u}(\bar{x}, t) - \bar{w}] - \frac{3q(r)}{4\pi\rho_p r^2} \nabla_x \phi + \bar{g} \right] f \right) = D\Delta_w f \quad (1)$$

с условием поглощения частиц границей  $f(\bar{x}, \bar{w}, r)(\bar{w}, \bar{n}) \geq 0$ , где  $\bar{n}$  — внешняя нормаль.

Потенциал электрического поля с учетом влияния частиц определяется уравнением электростатики Максвелла

$$\Delta_x \phi = -\frac{1}{\epsilon_0} \iint_{r w} q(r) f(\bar{x}, \bar{w}, r, t) dw dr \quad (2)$$

с условием Дирихле на границе (полагаем, что частицы получают заряд вне расчетной области), а уравнение движения в системе Навье-Стокса должно быть дополнено интегральным членом, учитывающим влияние частиц

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u}, \nabla_x) \bar{u} - \frac{\mu}{\rho_f} \Delta \bar{u} + 6\pi \frac{\mu}{\rho_f} \iint_{r w} r (\bar{u}(\bar{x}, t) - \bar{w}) f(\bar{x}, \bar{w}, r, t) dw dr + \frac{\nabla_x p}{\rho_f} = 0, \\ \operatorname{div} \bar{u} = 0, \quad (3)$$

где  $p$  — поле давления, а  $\rho_f$  — плотность несущей среды.

На участке, где несущая среда поступает в расчетную область, задаем поле скоростей, объемную плотность частиц в потоке, их заряд и функцию распределения по радиусам, полагая, что скорости частиц на входе соответствуют скорости потока. На участке, где несущая среда покидает область, ставим условие свободного вытекания  $\partial \bar{u} / \partial n = 0$ , а на твердой стенке — условия не протекания  $u_n = 0$  и прилипания  $u_\tau = 0$ .

В начальный момент задаем распределение скорости, удовлетворяющее уравнению неразрывности и граничным условиям, а также начальное значение функции распределения, удовлетворяющее граничным условиям.

Для практических приложений типична ситуация, когда длина скоростной релаксации частиц мала по сравнению с пространственными масштабами изменения поля скорости несущей среды и электрического поля. В этом случае распределение скоростей частиц близко к распределению Максвелла и уравнение Ланжевена движения частиц можно записать в виде

$$\frac{d\bar{x}_p}{dt} = \bar{u} + \frac{2}{3\mu} q(r_p) \nabla_x \varphi + \frac{2r_p^2 \rho_p}{9\pi\mu} \bar{g} + \frac{\bar{\xi}}{6\pi\mu r_p},$$

а соответствующее уравнение Фоккера-Планка относительно функции распределения частиц  $f = f(\bar{x}, r, t)$  дисперсной фазы в пространстве по радиусам

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \left( \nabla_x, \left[ \bar{u} - \frac{q(r)}{6\mu} \nabla \varphi + \frac{2\rho_p r^2}{9\mu} \bar{g} \right] f \right) = \frac{D}{6\pi r \mu} \Delta_x f. \quad (4)$$

Тогда система уравнений (1)-(3), описывающих нестационарные движения мелких твердых заряженных частиц в вязкой несжимаемой среде может быть значительно упрощена. Потенциал электрического поля определяется уравнением

$$\Delta_x \varphi = -\frac{1}{\varepsilon_0} \int_r q(r) f(\bar{x}, r, t) dr, \quad (5)$$

а уравнения системы Навье-Стокса с учетом влияния частиц имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u}, \nabla_x) \bar{u} - \frac{\mu}{\rho_f} \Delta \bar{u} + \frac{\nabla_x \varphi}{\rho_f} \int_r q(r) f(\bar{x}, r, t) dr - \\ - \frac{4\rho_p}{3\rho_f} \bar{g} \int_r r^3 f(\bar{x}, r, t) dr + \frac{1}{\rho_f} \nabla_x p = 0, \quad (\nabla_x, \bar{u}) = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

В работе [9] получена система уравнений, описывающая движение мелких однородных малоинерционных частиц под действием гравитации. Система (4)-(6) является обобщением этой системы на случай движения сильно неоднородных заряженных частиц.

## 2. Численная реализация

Для дискретизации уравнений движения несущей среды используем метод конечных разностей на прямоугольной сетке с шахматным расположением узлов (сетка MAC-типа) — давление вычисляем в центрах ячеек, а составляющие скорости на их гранях [10]. При этом строим разностную сетку так, чтобы граница расчетной области проходила через точки, в которых вычисляется нормальная составляющая скорости, а для задания узловых значений касательной составляющей скорости используем линейную интерполяцию. На разнесенной сетке поле скоростей и давления аппроксимируется со вторым порядком точности с использованием

значений составляющих скорости и значений давления в соседних точках. Такая сетка, как замечено в работе [10], позволяет связать значения скорости и давления в соседних узлах и избежать появления осцилляций в решении, которые возникают при использовании центральных разностей на неразнесенной сетке.

Для интегрирования по времени уравнений движения несущей фазы используем схему типа «предиктор-корректор». На первом этапе считаем, что перенос количества движения осуществляется за счет конвекции, диффузии, а также увлечения несущей фазы движущимися частицами и определим промежуточное поле скоростей  $\tilde{u}$

$$\frac{\tilde{u} - \bar{u}^{(n)}}{\Delta t} + (\bar{u}^{(n)}, \nabla_x) \bar{u}^{(n)} - \frac{\mu}{\rho_f} \Delta \bar{u}^{(n)} + 6\pi \frac{\mu}{\rho_f} \int \int r (\bar{u}^{(n)} - \bar{w}) f^{(n)} d\omega dr = 0,$$

которое сохраняет во внутренних точках вихревые характеристики, но не удовлетворяет условию неразрывности. Используем явную схему Адамса-Башфорта второго порядка точности, которая, хотя и имеет нестандартное начало счета и определенные сложности при необходимости изменить шаг в процессе счета, но обладает лучшей устойчивостью по сравнению, например, с методами Рунге-Кутты и отличается меньшей трудоемкостью вычислений. Дискретизацию уравнения изменения количества движения среды проводим так, чтобы разностные операторы наследовали основные свойства исходных дифференциальных операторов — для обеспечения свойства транспортности и консервативности при дискретизации конвективных членов используем схему с разностями против потока, направление которого определяется средними значениями скоростей на границах ячейки [11]; для дискретизации диффузных потоков используем схему с центральными разностями, а интегральный член в уравнении движения, учитывающий влияние частиц на жидкость, заменим соответствующей интегральной суммой.

Далее определяем давление, решая уравнение Пуассона, которое вытекает из уравнения движения с учетом соленоидальности вектора скорости  $\bar{u}^{(n+1)}$

$$\Delta \tilde{p} = \rho_f \frac{\nabla \tilde{u}}{\Delta t}$$

и, предполагая, что перенос количества движения осуществляется за счет градиента давления, определяем новое поле скоростей несущей среды  $\bar{u}^{(n+1)}$

$$\frac{\bar{u}^{(n+1)} - \tilde{u}}{\Delta t} = -\frac{\nabla \tilde{p}}{\rho_f}.$$

Так как граничные условия для давления отсутствуют в физической постановке задачи, то для их задания используем уравнение изменения количества движения в проекции на нормаль к границе расчетной области [10].

Потенциал электрического поля, создаваемого частицами дисперсной фазы, определяем из уравнения Пуассона

$$\Delta\varphi^{(n+1)} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \int \int_{r w} q(r) f^{(n)} dw dr .$$

Для дискретизации оператора Лапласа используем схему с центральными разностями, интеграл в правой части заменяем соответствующей интегральной суммой, а решение проводим итерационным методом последовательной верхней релаксации.

Для решения уравнения Фоккера-Планка формируем в соответствии с начальным значением функции распределения ансамбль частиц, имеющих индивидуальные радиусы и координаты. Эти частицы перемещаются в соответствии с действующими на них силами

$$\begin{aligned} \frac{\bar{x}_{s,i}^{(n+1)} - \bar{x}_{s,i}^{(n)}}{\Delta t} &= \bar{w}_{s,i}^{(n+1)} , \\ \frac{\bar{w}_{s,i}^{(n+1)} - \bar{w}_{s,i}^{(n)}}{\Delta t} &= \frac{9\mu \left[ \bar{u}^{(n+1)}(\bar{x}_{s,i}^{(n)}) - \bar{w}_{s,i}^{(n)} \right]}{2r_{s,i}^2 \rho_p} - \\ &- \frac{3}{4\pi r_{s,i}^2 \rho_p} q(r_{s,i}) \nabla_x \varphi^{(n+1)}(\bar{x}_{s,i}^{(n)}) + \bar{g} + \bar{\xi}_i , \end{aligned}$$

где  $r_{s,i}$  — радиус  $i$ -ой частицы ( $i = \overline{1, N_s}$ );  $\bar{x}_{s,i}$  — ее координаты;  $\bar{w}_{s,i}$  — скорости;  $\bar{\xi}_i$  —  $N_s$  независимых винеровских процессов ( $\sigma = \sqrt{2D\Delta t}$ ). Как известно, возникающая при этом ошибка определения функции распределения убывает со скоростью порядка  $1/\sqrt{N_s}$ .

В случае малоинерционных частиц

$$\begin{aligned} \frac{\bar{x}_{s,i}^{(n+1)} - \bar{x}_{s,i}^{(n)}}{\Delta t} &= \bar{w}_{s,i}^{(n+1)} , \\ \bar{w}_{s,i}^{(n+1)} &= \bar{u}^{(n+1)}(\bar{x}_{s,i}^{(n)}) - \frac{q(r_{s,i})}{6\pi\mu} \nabla_x \varphi^{(n+1)}(\bar{x}_{s,i}^{(n)}) + \frac{2r_{s,i}^2 \rho_p}{9\mu} [\bar{g} + \bar{\xi}_i] . \end{aligned}$$

Детали численной реализации алгоритма, касающиеся расчета поля скоростей и давления несущей среды, приведены в [2], где рассмотрен метод решения задачи, описывающей движение электрически нейтральных микрочастиц. Здесь отметим некоторые особенности алгоритма. В частности, для получения достаточной точности расчета нужно с одной стороны уменьшать размеры ячеек МАС сетки, а с другой стороны — поддерживать достаточно большое число частиц в ячейках, т. е. увеличивать число частиц в расчетной области. При уменьшении ячеек в  $k$  раз нужно соответственно увеличить в  $k^n$  раз число частиц (для «плоской» задачи  $n = 2$ , для «пространственной»  $n = 3$ ). Во-вторых, при определении потенциала электрического поля для моделирования реальных технологических

процессов расчетная область и, следовательно, разностная сетка, вообще говоря, может не совпадать с расчетной областью и сеткой, используемой для дискретизации уравнений движения несущей среды. Кроме того, для обеспечения достаточной точности расчета за приемлемое время, используемый при моделировании движения частиц временной шаг, вообще говоря, может быть выбран отличающимся от временного шага, используемого при расчете движения несущей среды.

### 3. Вычислительный эксперимент

В настоящее время для моделирования движения мелкодисперсных частиц в аппаратах электронно-ионной технологии применяются методики, которые носят ориентировочный характер и не позволяют учесть все физически значимые факторы. В частности, при измельчении исходного сырья невозможно получить достаточно однородный мелкодисперсный порошок и одной из важных технологических задач является задача классификации — т. е. разделения микрочастиц на фракции по размерам. Эта задача может быть успешно решена за счет реализации воздействия на микрочастицы комбинации разнонаправленных сил — гравитационной, которая пропорциональна объему частицы и силы Кулона, которая пропорциональна радиусу частицы для наиболее мелких частиц и площади поверхности для более крупных частиц. Однако эффективность и точность классификации зависит от многих факторов, в частности, от взаимного отталкивания одноименно заряженных частиц, наличия эффекта увлечения потока движущимися частицами, броуновского рассеяния частиц. Эти факторы в существующих методиках или игнорируются или же для их учета применяются различные эмпирические приближения, точность которых невелика.

Например, при измельчении в атритере нитрида бора диапазон характерных радиусов получаемых микрочастиц лежит в очень широком диапазоне  $0,01 \div 100$  мкм и для получения нанопорошка с требуемой однородностью необходимо отсеять частицы, радиусы которых больше  $0,5$  мкм (разумеется, таких частиц немного, но их наличие в нанопорошке недопустимо).

Микрочастицы, которые получают отрицательный заряд в процессе измельчения и при необходимости дополнительно могут быть дозаряжены в поле коронного разряда, подаются в ламинарный поток воздуха вблизи центральной зоны в промежуток между двумя горизонтальными пластинами, где создано электрическое поле  $E = 0,5 \cdot 10^5$  В/м (типичное значение для аппаратов электронно-ионной технологии) и оседают под действием силы Кулона и силы тяжести на нижней пластине, на которую подан положительный потенциал.

Соотношение между силой Кулона и силой тяжести зависит от радиуса частицы

$$\frac{f^q}{f^g} \approx \frac{3\epsilon_0 E}{\rho_p g} \left[ \left( 1 + 2 \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \right) E \frac{1}{r_p} + \frac{W}{e} \frac{1}{r_p^2} \right].$$

Для наиболее крупных частиц, радиусы которых больше  $100$  мкм основной является сила тяжести, которая вызывает быстрое оседание таких частиц. Но по мере



Таблица 1

Силы, действующие на частицы, и скорости их оседания

Радиус частицы, мкм	100	10	1	0,1	0,01
Характерный заряд (в элементарных зарядах)	$8 \cdot 10^5$	9000	200	20	2
Кулоновская сила/сила тяжести	0,14:1	1,6:1	40:1	$2,5 \cdot 10^3:1$	$2,5 \cdot 10^5:1$
Характерная скорость оседания, мм/с	3000	70	11	7	6,9

уменьшения радиуса частиц сила тяжести быстро убывает, а влияние силы Кулона возрастает и для частиц, радиусы которых лежат в диапазоне  $1 \div 100$  мкм, существенными являются как сила тяжести, так и сила Кулона. Для наиболее мелких частиц, радиус которых меньше 1 мкм, сила Кулона намного больше силы тяжести и последняя может не учитываться. Соответственно характерная скорость оседания частиц

$$u \approx \frac{2}{9\mu} r_p^2 \rho_p g + \frac{2}{3\mu} \varepsilon_0 \left( 1 + 2 \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} \right) E^2 r_p + \frac{2}{3\mu} \varepsilon_0 \frac{W}{e} E$$

вначале быстро убывает по мере уменьшения радиуса частицы, а для частиц, радиус которых меньше 0,1 мкм, становится практически постоянной (табл. 1).

Таким образом, траектории оседания частиц, радиусы которых меньше 0,1 мкм практически одинаковы, а для больших частиц будут существенно иными, что позволяет реализовать процесс выделения нужной наночастицы. Однако в аппаратах электронно-ионной технологии желательнее проводить обработку микрочастиц при увеличенной объемной плотности частиц в потоке. При этом движущиеся крупные частицы увлекают воздух, который «затягивает» мелкие частицы. Далее увлекаемый воздух, сталкиваясь со стенками аппарата, отклоняется, образуя вихревые течения, что дополнительно влияет на движение микрочастиц. Кроме того, электрическое поле движущихся частиц искажает электрическое поле в аппарате, что также приводит к изменению траекторий движения частиц, прежде всего наиболее мелких, из-за отталкивания заряженных частиц друг от друга. И, наконец, броуновская диффузия вызывает «размывание» зоны осаждения микрочастиц того или иного диаметра. Таким образом меняется как положение, так и размеры зон осаждения микрочастиц того или иного радиуса и игнорирование этого приводит к загрязнению выделяемой фракции частицами других размеров.

На рис. 1а видно, что при малой плотности частиц в потоке только относительно небольшая область оказывается «загрязненной» частицами больших радиусов, размер этой области зависит от степени диффузии и ширины зоны, в которую подаются частицы. На рис. 1б видно, что при увеличенной плотности частиц в потоке область осаждения наночастиц расширяется — с одной стороны крупные частицы, опускаясь, увлекают воздух и «затягивают» мелкие, поэтому они начинают оседать раньше; с другой стороны отталкивание друг от друга заряженных частиц приводит

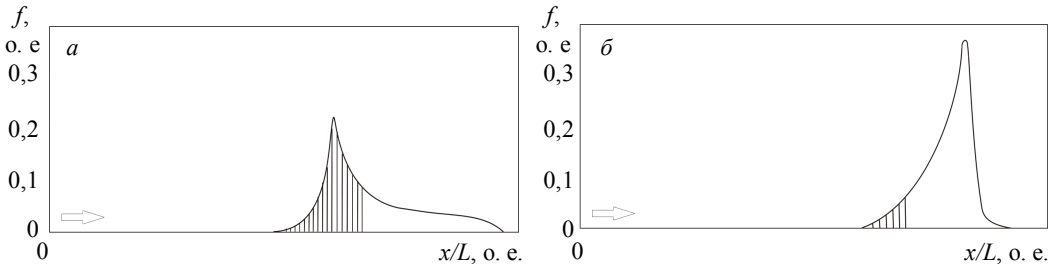


Рис. 1. Плотность  $f$  распределения по длине  $L$  пластины осевших частиц нанодисперсии с радиусом менее 0,5 мкм (штриховкой выделена область, где присутствуют также частицы больших радиусов)  
 $a$  — малая плотность частиц в потоке;  $b$  — увеличенная плотность частиц в потоке

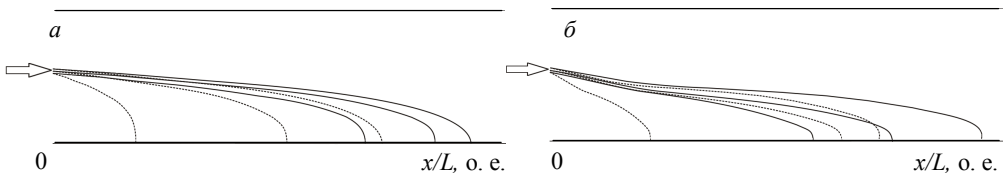


Рис. 2. Типичные траектории оседания частиц нанодисперсии с радиусом менее 0,5 мкм (пунктиром выделены траектории более крупных частиц):  
 $a$  — малая плотность частиц в потоке;  $b$  — увеличенная плотность частиц в потоке

к тому, что часть мелких частиц смещается к центру потока воздуха и потому оседает позже. При этом область «загрязненная» крупными частицами также увеличивается.

На рис. 2а показаны типичные траектории оседания наночастиц при малой плотности частиц в потоке, а на рис. 2б — траектории оседания наночастиц при увеличенной плотности частиц в потоке. Видно, что в начале движения наночастицы «увлекаются» крупными оседающими частицами, а по мере того, как наиболее крупные частицы оседают, все большее влияние начинают оказывать силы отталкивания частиц друг от друга.

Таким образом, решение задачи в полной постановке показывает, что перечисленные факторы, обычно не принимаемые во внимание, могут существенно повлиять на движение частиц. Следовательно, эти факторы должны учитываться при моделировании движения микрочастиц в аппаратах электронно-ионной технологии. Предложенный алгоритм, как показывают вычислительные эксперименты, позволяет такое моделирование реализовать.

Заметим, что, разумеется, приведенные выше описания процесса электроклассификации носят чисто качественный, иллюстративный характер и его реальное протекание существенно зависит от радиусов частиц, их масс, концентрации в потоке, скорости и вязкости среды и т. п.

**Выводы.** Предложен метод численного решения системы уравнений Навье-Стокса-Пуассона-Фоккера-Планка, описывающей нестационарные движения мелких твердых заряженных частиц в вязкой несжимаемой среде под действием гравитационного и электростатического полей. Метод основан на схеме расщепления по физическим факторам и использовании конечных разностей на прямоугольной сетке с шахматным расположением узлов для дискретизации уравнений Навье-Стокса и Пуассона и моделировании процесса движения частиц методом Монте-Карло. Выполнено моделирование процесса электроклассификации в воздушной среде за счет воздействия гравитационных и электрических сил заряженных микрочастиц нитрида бора. Полученные результаты позволяют количественно описать наблюдаемые в экспериментах эффекты, подтверждают работоспособность алгоритма и дают основание рассчитывать на моделирование достаточно сложных процессов, необходимое для разработки новых и совершенствования имеющихся технологий.

### Литература

- [1] *Анощенко О. А.* Существование в целом обобщенного решения системы уравнений движения суспензии; в кн.: Динамические системы и комплексный анализ; сб. научн. трудов. — Киев: Наук. думка, 1992. — С. 112-119.
- [2] *Фенченко В.Н.* Моделирование нестационарных течений взвеси мелких твердых частиц в вязкой несжимаемой жидкости // Фіз.-мат. моделювання та інформ. технології. — 2010. — Вип. 11. — С. 189-199.
- [3] *Фенченко В. Н., Кравченко О. В., Момот В. И.* Моделирование нестационарных течений дисперсных систем с вязкой дисперсионной средой и твердой, сильно неоднородной дисперсной фазой, несущей электрический заряд // Електричні та теплотехнічні процеси й устаткування. Вісник НТК ХПП. — 2012. — № 8. — С. 143-149.
- [4] *Фенченко В. Н., Кравченко О. В., Момот В. И.* Движение заряженных диэлектрических мелкодисперсных частиц в аппаратах электронно-ионной технологии // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. — 2012. — № 3/10(57). — С. 50-53.
- [5] *Maxey M. R., Riley J. J.* Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow // Phys. Fluids. — 1983. — Vol. 26, Issue 4. — P. 883-889.
- [6] Высоковольтные электротехнологии; под ред. *И. П. Верещагина*. — Москва.: из-во МЭИ, 1999. — 204 с.
- [7] *Дикалюк А. С., Суржиков С. Т.* Учет процесса зарядки твердых частиц при моделировании эволюции пылевой компоненты плазмы в нормальном тлеющем разряде // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. — 2011. — Т. 11. — С. 1-5.
- [8] *Опарин В. Б., Петровская М. В., Виноградов К. Н.* Зарядка и подвижность субмикронных и наночастиц в катодной области тлеющего разряда // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. — 2009. — Т. 11, № 5(2). — С. 408-411.
- [9] *Невский Ю. А., Осипцов А. Н.* Моделирование гравитационной конвекции суспензий. — Письма в ЖТФ. — 2009. — Т. 35, вып. 7. — С. 98-105.
- [10] *Волков К. Н.* Реализация схемы расщепления на разнесенной сетке для расчета нестационарных течений вязкой несжимаемой жидкости // Вычислительные методы и программирование. — 2005. — Т. 6. — С. 269-282.
- [11] *Роуч П.* Вычислительная гидродинамика. — Москва: Мир, 1980. — 618 с.

## **Simulation of the motion of small solid electric charge particles in viscous incondensable environment under the influence of gravitational and electric fields**

Vladimir Fenchenko

*The quantitative solution method of the Navier-Stocks-Puason-Fokker-Plank equations system describing non-stationary flows of small solid electric charge particles in viscous incondensable environment is offered. The method is based on the scheme of splitting on physical factors for the equation of motion of the carrier medium and the use of statistical modelling for solving the Fokker-Planck equation for the particle distribution function. The numerical simulation of the separation process on the characteristic radii of crushed boron nitride microparticles under the influence of gravitational and Coulomb forces is executed.*

## **Моделювання руху дрібних твердих заряджених частинок у в'язкому нестисливому середовищі під дією гравітаційного та електричного полів**

Володимир Фенченко

*Запропоновано метод чисельного розв'язку системи рівнянь Нав'є-Стокса-Пуасона-Фоккера-Планка, що описує нестационарні течії суспензії дрібних твердих заряджених частинок у в'язкому нестисливому середовищі. Метод ґрунтується на схемі розщеплення за фізичними факторами для рівняння руху несучого середовища та використанні статистичного моделювання для розв'язання рівняння Фоккера-Планка для функції розподілу часток. Виконано чисельне моделювання процесу розділення за характерними радіусами мікрочасток подрібненого нітриду бору під дією гравітаційної та кулонівської сил.*

Представлено професором П. Костробієм

Отримано 21.09.12