

На правах рукописи



СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
SIBERIAN FEDERAL UNIVERSITY

Кушнаренко Андрей Викторович

Разработка модели и алгоритмов расчёта фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц и кластеров в разреженной газовой среде на основе метода Монте-Карло

Специальность 05.13.18 —
«математическое
моделирование, численные методы и комплексы программ»

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Красноярск — 2019

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Сибирский федеральный университет».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Черемисин Александр Алексеевич

Официальные оппоненты: **Каргин Борис Александрович,**
доктор физико-математических наук, профессор,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук,
заведующий лабораторией, профессор

Плотников Михаил Юрьевич,
кандидат физико-математических наук,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук,
старший научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук, г. Томск

Защита состоится 05 ноября 2019 г. в 15 часов на заседании диссертационного совета Д 003.061.02 при Институте вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук по адресу: проспект академика Лаврентьева, 6, 630090, Новосибирск, Россия.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИВМиМГ СО РАН, <http://icmmg.nsc.ru>.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: проспект академика Лаврентьева, 6, 630090, Новосибирск, Россия, учёному секретарю диссертационного совета Д 003.061.02.

Автореферат разослан 08 июля 2019 года.
Телефон для справок: +7 (383) 330-71-59.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 003.061.02,
д-р физ.-мат. наук



Сорокин Сергей Борисович

Общая характеристика работы

Актуальность работы. В настоящее время наблюдается повышенный интерес к задачам моделирования коагуляции аэрозольных частиц с учётом влияющих на неё факторов, что связано с широким распространением этого процесса в природе и технике, в частности, в нанотехнологиях и в задачах по борьбе с загрязнением атмосферы.

Теоретическое описание явления коагуляции аэрозольных частиц предложено достаточно давно. Базовые представления о ней имеют начало в работах А. Эйнштейна, М. Смолуховского, П. Ланжевена, С. Чандрасекара, Н. А. Фукса.

Сегодня одним из эффективных инструментов изучения коагуляции является численное моделирование. Теоретически и экспериментально установлено, что на процесс коагуляции влияет множество факторов, и в реальных условиях он практически никогда не протекает без их участия. К таким факторам относятся: присутствие в газовой среде звуковых волн (акустическая коагуляция), турбулентность, внешние силы (гравитационная коагуляция, коагуляция в электрическом или магнитном поле), влажность, начальный дисперсионный состав, градиент температуры газовой среды (термофоретическая коагуляция), наличие между аэрозольными частицами сил взаимодействия.

Актуальность задачи моделирования влияния различных факторов на коагуляцию аэрозолей обусловлена необходимостью управления этими процессами в технологических применениях, а также в природной среде.

Что касается взаимодействия аэрозольных частиц между собой, то тут, главным образом, основное внимание привлечено к разработке моделей и проведению численных расчётов, в которых в явном виде учитываются силы Ван-дер-Ваальса и электростатические силы, когда аэрозольные частицы имеют заряд. Однако, в последнее время появились работы, в которых на основании разработки соответствующих моделей и результатов численных расчётов показано, что к взаимодействию аэрозольных частиц могут приводить газокинетические явления. Так, например, известно взаимодействие аэрозольных частиц, вовлечённых в термофоретическое движение.

Исследование влияния света на коагуляцию аэрозольных частиц является одним из сложнейших вопросов физики и химии аэродисперсных систем. Достаточно давно известно, что на одиночные аэрозольные частицы в разреженной газовой среде при освещении их светом могут действовать фотофоретические силы, меняющие механическое поведение частиц. Имеется большое число работ, посвящённых получению аналитических выражений и построению численных моделей, которые позволяют оценить величину фотофоретических сил для аэрозольных частиц, по крайней мере, простейшей формы.

Из качественных соображений можно понять, что в разреженной газовой среде при освещении аэрозольных частиц должно возникать их взаимодействие между собой – фотофоретическое взаимодействие. Качественная модель этого

эффекта приведена далее в предлагаемой диссертации. Встаёт вопрос о количественной оценке величины этих сил. Данная диссертационная работа и посвящена актуальной задаче разработки численной модели фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц в разреженной газовой среде, реализации соответствующего математического обеспечения и проведению численных экспериментов по исследованию величины этих сил и их влияния на коагуляцию. Основой для построения численной модели является метод статистического моделирования, теория цепей Маркова и специальные матрицы переноса¹, которые позволяют получить решение газокинетического уравнения Больцмана в приближении свободномолекулярного режима для сложносоставных аэрозолей – аэрозольных кластеров.

Целью исследования является разработка математической модели и алгоритмов расчёта фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц и кластеров в разреженной газовой среде на основе метода Монте-Карло, создание комплекса проблемно-ориентированных программ и проведение на этой основе численных экспериментов по изучению сил фотофоретического взаимодействия и их влияния на коагуляцию аэрозольных частиц в условиях вакуумных камер и атмосферы Земли. Для достижения цели исследования были поставлены и решены следующие **задачи**:

1. Разработать вероятностную модель, описывающую фотофоретическое взаимодействие в разреженной газовой среде между поглощающими излучение аэрозольными частицами или кластерами, состоящими из сферических частиц.
2. Разработать алгоритмы решения задачи расчёта сил фотофоретического взаимодействия между аэрозольными кластерами на основе метода Монте-Карло и использования матриц переноса.
3. Реализовать комплекс алгоритмов и проблемно-ориентированных программ (или иначе предметно-ориентированный программно-алгоритмический комплекс) для проведения вычислительного эксперимента по оценке сил фотофоретического взаимодействия в разреженной газовой среде вакуумных камер и атмосферы Земли.
4. Провести вычислительные эксперименты по исследованию сил фотофоретического взаимодействия, возникающих между аэрозольными частицами и кластерами в разреженной газовой среде вакуумных камер и атмосферы Земли, а также оценке влияния этих сил на коагуляцию аэрозолей.

Научная новизна заключается в следующем:

1. Разработана вероятностная модель, описывающая фотофоретическое взаимодействие в разреженной газовой среде между поглощающими

¹Cheremisin, A. A. Transfer matrices and solution of the heat-mass transfer problem for aerosol clusters in a rarefied gas medium by the Monte Carlo method / A. A. Cheremisin // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2010. Vol. 25, issue 3. P. 209–233.

- изучение аэрозольными частицами и кластерами, состоящими из сферических частиц.
2. Разработан алгоритм решения задачи расчёта сил фотофоретического взаимодействия между аэрозольными кластерами на основе метода Монте-Карло и использования специальных матриц переноса.
 3. В результате проведения комплексного вычислительного эксперимента показано, что силы фотофоретического отталкивания между аэрозольными частицами микронного и субмикронного размера могут достигать десятков и даже сотен величин силы тяжести как в вакуумных камерах, так и в атмосфере Земли даже при сравнительно небольших интенсивностях падающего излучения, эквивалентного интенсивности солнечного света. Эти силы убывают обратно пропорционально квадрату расстояния между центрами частиц и, таким образом, являются дальнедействующими. Установлено, что в случае субмикронных частиц, подобно частицам сажи, хорошо поглощающими солнечное излучение видимого диапазона, фотофоретическое взаимодействие снижает константу их коагуляции вплоть до нескольких порядков величины.

Теоретическая значимость заключается в том, что показано, что на основе метода Монте-Карло и специальных матриц переноса можно построить эффективные алгоритмы и программное обеспечение для расчёта сил фотофоретического взаимодействия аэрозольных кластеров в разреженной газовой среде. На основе численных экспериментов показано, что эти силы значительны и имеет место существенное влияние этих сил на коагуляцию среднedisперсных и грубодисперсных аэрозольных частиц, поглощающих видимое и тепловое излучения.

Практическая значимость работы заключается в том, что реализован предметно-ориентированный программно-алгоритмический комплекс (или комплекс проблемно-ориентированных программ) для проведения вычислительного эксперимента по оценке фотофоретических сил, действующих на аэрозольные кластеры, и фотофоретического взаимодействия аэрозольных кластеров, состоящих их сферических частиц, в условиях разреженной газовой среды вакуумных камер или стратосферы и мезосферы Земли. В частности, комплекс может быть использован в рамках геоинженерных проектов для оценки влияния фотофореза и фотофоретического взаимодействия на время жизни искусственного аэрозоля и аэрозольную стратификацию.

Методы исследования: методы математического и статистического моделирования (методы Монте-Карло), теории вероятностей и математической статистики, теории молекулярного переноса, численного моделирования, объектно-ориентированного, процедурного и обобщённого программирования.

Достоверность полученных результатов обеспечивается последовательным применением методов математического и статистического моделирования, теории переноса в приближении свободномолекулярного режима, современных

методов разработки программ на основе объектно-ориентированного и процедурного программирования и подтверждается результатами тестовых расчётов в сопоставлении с аналитическими оценками.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Вероятностная модель, описывающая фотофоретическое взаимодействие в разреженной газовой среде между поглощающими изучение аэрозольными частицами и кластерами, состоящими из сферических частиц.
2. Алгоритм решения задачи расчёта сил фотофоретического взаимодействия между аэрозольными кластерами на основе метода Монте-Карло и использования специальных матриц переноса.
3. Комплекс проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента по оценке фотофоретического взаимодействия аэрозольных кластеров, состоящих их сферических частиц, в условиях разреженной газовой среды вакуумных камер или стратосферы и мезосферы Земли.
4. Результаты проведения комплексного вычислительного эксперимента, согласно которым силы фотофоретического отталкивания между аэрозольными частицами микронного и субмикронного размера могут достигать десятков и даже сотен величин силы тяжести как в вакуумных камерах, так и в атмосфере Земли даже при сравнительно небольших интенсивностях падающего излучения, эквивалентного интенсивности солнечного света. Эти силы убывают обратно пропорционально квадрату расстояния между центрами частиц и, таким образом, являются дальнodelствующими. В случае субмикронных частиц, подобно частицам сажи хорошо поглощающими солнечное излучение видимого диапазона, фотофоретическое взаимодействие снижает константу их коагуляции вплоть до нескольких порядков величины.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на: Рабочей Группе «Аэрозоли Сибири», Томск (XVI, 2009; XIX, 2012); European Aerosol Conference (Манчестер, Великобритания, 2011), Международном симпозиуме «Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы» (XVIII, Томск, 2011; XIX, Томск, 2013; XXI, Томск, 2015); XIII Международной конференции по эвентологической математике и смежным вопросам (Красноярск, 2009); Международной конференции «Естественные и антропогенные аэрозоли» (Санкт-Петербург, 2010); International Conference on High performance computing HPC-UA'2012 (Киев, 2013); Международном симпозиуме «Атмосферная Радиация и Динамика» (МСАРД) Санкт-Петербург, 2011, 2013, 2015; Международной конференции «Марчуковские научные чтения - 2018» (Новосибирск, 2018); семинаре «Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике» под руководством член-корреспондента РАН Г. А. Михайлова (Новосибирск, 11 октября 2018, ИВМиМГ СО РАН); объединённом семинаре отделения лазерного зондирования и научно-образовательного центра ИОА СО РАН под руководством д.ф.-м.н. Матвиенко Г. Г. (Томск, 13 февраля 2019,

ИОА СО РАН); объединённом семинаре под руководством член-корреспондента РАН С. И. Кабанихина (Новосибирск, 15 февраля 2019, ИВМиМГ СО РАН).

Личный вклад соискателя состоит в разработке модели и алгоритмов вычисления сил фотофоретического взаимодействия аэрозольных кластеров и частиц на основе метода Монте-Карло и использования матриц переноса. Алгоритм расчёта матриц переноса в аэрозольных системах на основе метода статистического моделирования, предложенный Черемисиным А. А., дополнен соискателем алгоритмом построения аэрозольных кластеров, состоящих из сферических частиц, алгоритмом построения траекторий между столкновениями в системе, а также алгоритмом отражений для конкретных конфигураций поверхностей системы, а также алгоритмом построения и решения уравнений теплового баланса в системе. Предметно-ориентированный программно-алгоритмический комплекс, включая части, отвечающие за реализацию алгоритма статистического моделирования части, пользовательский интерфейс и алгоритм многопоточного статистического моделирования, разработаны лично соискателем. Результаты численных экспериментов получены лично соискателем.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 15 печатных изданиях, 3 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 12 — в тезисах докладов.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и приложения. Полный объём диссертации составляет 103 страницы, включая 38 рисунков. Список литературы содержит 93 наименования.

Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, формулируется цель и задачи, научная новизна, практическая и теоретическая значимость проведённого исследования, разъяснён личный вклад соискателя, изложены положения, выносимые на защиту, описана структура диссертации.

Первая глава посвящена обзору литературы и формулировке физической проблемы, рассмотренной в данной работе. В ней приведены общие сведения о коагуляции аэрозольных частиц, модель коагуляции с учётом взаимодействия аэрозольных частиц, рассмотренная Н. А. Фуксом, дан обзор работ, посвящённых факторам, оказывающим влияние на коагуляцию аэрозольных частиц. Далее обсуждается влияние газокINETических явлений на коагуляцию аэрозольных частиц. Оказывается, термофорез может приводить как к притяжению частиц друг к другу, так и к их отталкиванию, тем самым, влияя на их коагуляцию. В научной литературе также рассмотрена задача о термофоретической коагуляции при различных градиентах температуры среды. Таким образом, газокINETические явления рассматриваются как фактор, оказывающий влияние на коагуляцию аэрозолей. В то же время, влияние освещения частиц на коагуляцию в научной

литературе не рассмотрено вовсе. Удалось обнаружить одну единственную работу, в какой-то мере, косвенно, затрагивающую этот вопрос. Глава заканчивается формулировкой физической проблемы.

Вторая глава посвящена вероятностной модели, описывающей фотофотетическое взаимодействие в разреженной газовой среде между поглощающими излучение аэрозольными частицами и кластерами, состоящими из сферических частиц. Эта вероятностная модель основана на рассмотрении следующей *физической модели*. Пусть есть однородная разреженная газовая среда, характеризующаяся температурой T_0 , давлением p и средней массой молекул m . В этой газовой среде размещена аэрозольная система из двух одинаковых сферических частиц, радиус которых r_0 , а расстояние между центрами частиц равно $r_{12} \geq 2r_0$ (Рисунок 1). Разреженной газовой средой в такой ситуации, можно считать среду, для которой справедливо следующее: $Kn = l_{av}(T_0, p)/r_{12} \gg 1$, где Kn - число Кнудсена, l_{av} - средняя длина свободного пробега молекул. Частицы поглощают электромагнитное излучение видимого и ИК диапазонов, преобразуя его в тепло, поэтому температура их поверхностей выше температуры окружающей газовой среды. С поверхностями частиц соударяются молекулы газовой среды, имея до соударения скорость \vec{v}_+ из максвелловского распределения по скоростям, и передают частицам импульс. Индекс «+» соответствует молекулам, падающим на поверхность, а «-» уходящим. Это соударение происходит в рамках классической максвелловской зеркально-диффузионной схемы взаимодействия газовых молекул и разогретых поверхностей. Сутью этой схемы является то, что молекула с вероятностью α покидает точку соударения со скоростью \vec{v}_- , соответствующей максвелловскому распределению по скоростям для температуры равной температуре поверхности в этой точке. Соответственно, с вероятностью $(1 - \alpha)$ молекула покидает точку без изменения модуля скорости по зеркальному закону: $|\vec{v}_+| = |\vec{v}_-|$. Если молекула попадает на ту часть одной из частиц, которая обращена к другой частице, то после соударения она имеет шанс достигнуть поверхности этой другой частицы и испытать соударение с ней. В общем случае, молекула может испытать целую серию столкновений с поверхностями аэрозольных частиц, прежде чем покинет аэрозольную систему.

Таким образом, если перейти к рассмотрению молекулярных потоков, то можно заключить следующее: в потоке молекул на обращённые друг к другу части поверхностей аэрозольных частиц есть молекулы, импульс которых больше импульса молекул газовой среды вне аэрозольной системы. Следовательно, этим частям поверхности передаётся больший импульс, а значит, возникает сила, расталкивающая аэрозольные частицы. (Рисунок 1). Как видно из описания физической модели, для того чтобы рассчитать силовое воздействие со стороны газовой среды на частицы такой аэрозольной системы, необходимо решить сложную нелинейную задачу тепломассопереноса, включающую в себя газокINETическую и электродинамическую части.

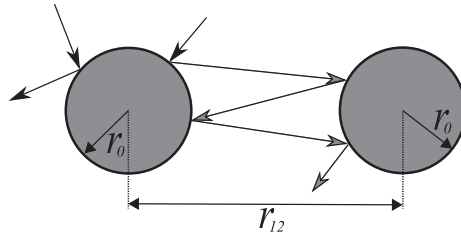


Рис. 1 — Физическая модель возникновения эффекта фотофоретического отталкивания

Величина газокINETической силы, действующей на частицу со стороны молекул из максвелловского распределения с температурой T_k может быть представлена в виде интеграла:

$$\vec{F}_{ph} = \int_S \left[\left(\frac{m}{2\pi k T_k} \right)^{3/2} m \int_0^\infty \left(\int_{\Omega^+(S)} N_{T_k}^+ \frac{\vec{v}_+}{|\vec{v}_+|} d\Omega - \int_{\Omega^-(S)} N_{T_k}^- \frac{\vec{v}_-}{|\vec{v}_-|} d\Omega \right) v^4 e^{-\frac{mv^2}{2kT_k}} dv \right] dS \quad (1)$$

где $\Omega^+(S)$ и $\Omega^-(S)$ угловые пространства прихода и ухода молекул, $N_{T_k}^+$ и $N_{T_k}^-$ - плотности соответствующих молекулярных потоков. Из соотношения (1) видно, что основную сложность представляет собой нахождение величин Ω и N , определяемых явлением аккомодации и геометрической конфигурацией аэрозольной системы.

Здесь является очень выгодным применение метода Монте-Карло, на основе которого можно построить вероятностную модель класса имитационных моделей природных явлений переноса². Вероятностная модель сформулирована на основе представления движения молекулы по аэрозольной системе как однородной обрывающейся цепи Маркова:

$$x_0^-, (x_1^+, x_1^-), \dots, x_N^+, \quad (2)$$

где индекс 0 означает некоторое начальное состояние, и перейти от рассмотрения реальной физической модели движения молекулы газовой среды по аэрозольной системе к вероятностно эквивалентной ей модели траекторий молекулярных пучков, возникающих в аэрозольной системе. В работе³ описана и обоснована методика, благодаря которой можно понизить порядок задачи за счёт специального разложения рядов Неймана по разделяющимся переменным скоростям и пространственным координатам молекул. Тогда можно использовать специальные матрицы переноса, сократить объёмы вычислений, повысить точность, получить зависимости физических величин от неизвестных температур частиц. Это

² Михайлов, Г. А. Оптимизация весовых методов Монте-Карло / Г. А. Михайлов. Наука, 1987. С. 238.

³ Cheremisin, A. A. Transfer matrices and solution of the heat-mass transfer problem for aerosol clusters in a rarefied gas medium by the Monte Carlo method / A. A. Cheremisin // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2010. Vol. 25, issue 3. P. 209—233.

позволяет существенно упростить решение, в общем случае, нелинейной задачи тепломассопереноса. Оценка значений элементов матриц переноса производится в результате статистического моделирования.

Вероятностная модель задачи базируется на следующих предположениях:

1. Геометрическая модель аэрозольной системы представляет собой сферические поверхности, расположение центров которых и радиус известны априори. Каждой такой поверхности присвоен целочисленный неотрицательный индекс $i = 1 \dots N$, где N - число поверхностей, обозначающий индекс поверхности, и точно такой же индекс $j = 1 \dots N$, обозначающий индекс температуры. Известен также заранее и коэффициент аккомодации. В данной работе допущено, что коэффициент аккомодации равен 0,5 для всех частиц.
2. Вокруг аэрозольной системы строится опорная поверхность – сфера радиуса R_0 , таким, чтобы это была максимально облегающая сфера, т.е. сфера с минимально возможным радиусом, которую можно описать вокруг неё. Статистическое моделирование производится над геометрической моделью, эквивалентной исходной, но отмасштабированной таким образом, чтобы $R_0 = 1$. Опорной поверхности присваиваются индексы $i = 0; j = 0$.
3. Траектория молекулы начинается на опорной поверхности, и обрыв цепи Маркова происходит тогда, когда она пересекает её во второй раз. Это происходит обязательно.
4. Между столкновениями молекула движется по прямолинейной траектории и характеризуется состоянием $x_n(\chi_S, \chi_T, \vec{e}_\Omega)$, где n – номер столкновения, начиная с 0, χ_S - индикатор поверхности, имеющий значение индекса поверхности, с которой произошло последнее столкновение, χ_T – индикатор температуры, имеющий значение индекса температуры, которую молекула имеет в данном состоянии, \vec{e}_Ω – направляющий единичный вектор.
5. Закон присвоения значений индикаторам χ_S и χ_T заключается в следующем. При очередном столкновении с поверхностью, индикатору χ_S всегда присваивается значение её индекса. Индикатору χ_T присваивается значение индекса температуры поверхности только в случае реализации события диффузного отражения, иначе его значение остаётся прежним.

На основе этой вероятностной модели реализован следующий *алгоритм*.

Шаг 1. Реализуется начальное состояния траектории $x_0 (\chi_S = 0, \chi_T = 0, \vec{e}_\Omega)$ Для этого на поверхности опорной сферы реализуется начальная точка s молекулярной траектории. Генерируются два независимых стандартных случайных числа ψ_1 и ψ_2 . Компоненты радиус-вектора \vec{R} , направленного из центра в точку s сферы рассчитываются по следующим формулам: $R_z = 1 - 2\psi_1$, $R_y = \sqrt{1 - R_z^2} \sin 2\pi\psi_1$, $R_x = \sqrt{1 - R_z^2} \cos 2\pi\psi_2$

Шаг 2. Определяется направляющий вектор траектории \vec{e}_Ω . В точке s поверхности строится локальная система координат и рассчитывается матрица преобразования

компонент векторов их локальной системы в исходную. В локальной системе координат осуществляется моделирование случайного единичного вектора, направленного в полупространство с плотностью вероятности $\cos \theta/\pi$, где θ угол между направлением движения и нормалью к поверхности. Генерируются два независимых стандартных случайных числа ψ_1 и ψ_2 . Компоненты вектора \vec{e}_Ω рассчитываются по формулам: $e_z = \sqrt{\psi_1}$, $e_y = \sqrt{1-\psi_1} \sin 2\pi\psi_2$, $e_x = \sqrt{1-\psi_1} \cos 2\pi\psi_2$. Затем компоненты этого вектора пересчитываются в исходную систему координат.

Шаг 3. Ищется следующая точка пересечения молекулярной траектории с какой-либо аэрозольной поверхностью. Индикатору χ_S присваивается значение, соответствующее индексу поверхности. Если траектория вновь пресекает опорную поверхность, то это её завершает.

Шаг 4. С вероятностью α реализуется диффузное отражение. Соответственно, с вероятностью $(1-\alpha)$ реализуется зеркальное отражение. В случае зеркального отражения индикатор χ_T не меняет своего значения, а направляющий вектор \vec{e}_Ω рассчитывается по простой формуле $\vec{e}'_\Omega = \vec{e}_\Omega - 2(\vec{e}_\Omega, \vec{e}'_s)\vec{e}'_s$, где \vec{e}'_s - вектор нормали к поверхности в точке s , а \vec{e}_Ω - направляющий вектор траектории до столкновения. Если происходит диффузное отражение, то в точке s пересечения молекулярной траектории с поверхностью строится локальная система координат и рассчитывается матрица преобразования компонент вектора из локальной системы координат в исходную. Новое направление траектории выбирается в соответствии с полупространственной индикатрисой $\cos \theta/\pi$, а затем компоненты направляющего вектора пересчитываются в исходную систему координат. Индикатору χ_T присваивается значение равное индексу температуры поверхности, с которой столкнулась траектория.

Шаг 5. Цепь столкновений продолжается в результате повторения шагов 2 и 3 алгоритма.

Матрицы переноса могут быть получены в результате оценки веса в статистическом моделировании как математическое ожидание случайных величин:

$$\zeta_{i,k,c}^F = \sum_{j=0}^N [e_{\Omega c}(s_j, \Omega_j^+) - e_{\Omega c}(s_j, \Omega_j^-)] \delta_{i,\chi_S} \delta_{k,\chi_T}, P_{i,k,c}^F = E \zeta_{i,k,c}^F, c = x, y, z \quad (3)$$

Здесь суммирование производится по столкновениям. Индекс j означает номер столкновения, а N полное число столкновений. Статистическое усреднение значений $\zeta_{i,k,c}^F$ производится по числу реализаций пространственных траекторий, смоделированных по алгоритму, описанному выше. Знак плюс соответствует параметрам до столкновения в точке s_j , а знак минус относится к параметрам после столкновения. Символ δ_{ij} - символ Кронекера, равный 1, когда значения индексов равны, а в противном случае его значение равно нулю.

Фотофоретическая сила, действующая на систему частиц или на отдельную её частицу, определяется потоком импульса через поверхность аэрозольных тел частиц или тела соответственно. Для определённости будем рассматривать аэрозольную частицу с индексом 1. Для остальных частиц выражения для силы такие же. Используя матрицы переноса, выражение для расчёта фотофоретической

силы имеет следующий вид:

$$F_{1,c}^{ph} = 3\pi R_0^2 (p/\sqrt{T_0}) \sum_{k=1}^n P_{1,k,c}^F (\sqrt{T_k} - \sqrt{T_0}), c = x, y, z \quad (4)$$

Здесь $P_{i,k,c}^F$ означает элементы матрицы переноса импульса. Первый индекс соответствует индексу частиц в системе, второй – индексу температуры молекулы, соударяющейся с частицей, определённая набором $T = T_1, T_2, \dots, T_n$. Суммирование производится по всем температурам в системе. Элементы матрицы переноса не зависят от давления и температуры газа. Множитель R_0^2 возникает из-за того, что статистические расчёты проделаны в безразмерной системе.

Третья глава посвящена предметно-ориентированному программно-алгоритмическому комплексу программ или иначе комплексу проблемно-ориентированных программ (далее просто комплексу), для проведения вычислительного эксперимента. Поскольку использование комплекса предполагается для решения целого класса задач в области исследований фотофоретических явлений, до начала его разработки было проведено проектирование и выявление функциональных и нефункциональных требований к нему. Глава завершается разделом верификации реализации базового алгоритма статистического моделирования и расчёта фотофоретических сил. Для этого приводится сравнение аналитических расчётов фотофоретической силы для известной модели квазисферической аэрозольной частицы, рассмотренной Рохачеком⁴, с численными расчётами, полученными в программном комплексе. Показано, что газокINETическая часть алгоритмов реализована верно, а отличия обусловлены разностью моделей учёта ИК излучений.

Четвёртая глава посвящена результатам вычислительных экспериментов по изучению силы фотофоретического отталкивания между аэрозольными частицами в вакуумных камерах и атмосфере Земли. Глава начинается с изложения результатов исследования зависимости силы фотофоретического отталкивания аэрозольных частиц от расстояния между центрами частиц. Это очень важный результат, поскольку из него следует, что зависимость силы от расстояния при заданном давлении приближённо описывается зависимостью кулоновского типа (Рисунок 2)

$$F_{ph}(r_{12}) \approx C/r_{12}^2 \quad (5)$$

где C - постоянная. Вследствие этого при логарифмическом масштабе обеих осей зависимости имеют вид прямых. Результаты расчётов были аппроксимированы методом наименьших квадратов, используя функцию вида C/r_{12}^a , где подбирались параметры C и a . В результате, для всей кривой, было получено значение a равное 2,34. Если проводить аппроксимацию для участка, на котором $r_{12} > 4r_0$, то есть

⁴Rohatschek, H. Semi-empirical model of photophoretic forces for the entire range of pressures / H. Rohatschek // Journal of Aerosol Science. 1995. Vol. 26, no. 5. P. 717–734.

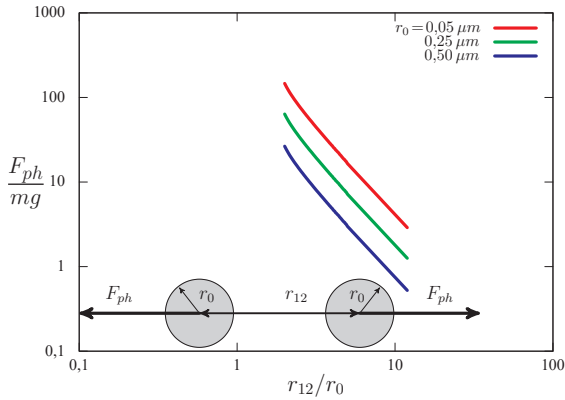


Рис. 2 — Зависимость относительной фотофоретической силы отталкивания одинаковых сферических аэрозольных частиц от расстояния между их центрами. Интенсивность падающего излучения $I = 1368 \text{ Вт/м}^2$, давление газа $p = 1000 \text{ Па}$, температура $T_0 = 293,15 \text{ К}$.

если исключить из аппроксимации небольшой начальный участок кривой силы, то a составляет уже 2,07. При дальнейшем увеличении исключаемого начального сегмента, a быстро достигает значения 2. При таком характере зависимости от расстояния силы *фотофоретического взаимодействия можно отнести её к типу дальнедействующих.*

Пятая глава посвящена оценке влияния фотофоретического взаимодействия на константу коагуляции аэрозольных частиц. Кулоновский характер зависимости фотофоретических сил от расстояния позволяет использовать аналогию с электростатическими взаимодействиями, возникающими между заряженными аэрозольными частицами. Известно решение задачи броуновской коагуляции для одноимённо заряженных аэрозольных частиц одинакового размера (Фукс, 1955). Выражение для константы коагуляции при учёте электростатического отталкивания имеет вид

$$K = \beta K_0, \beta = \frac{\lambda_{12}}{e^{\lambda_{12}} - 1}, \quad (6)$$

где K_0 - константа коагуляции для незаряженных частиц, β - поправочный коэффициент, $\lambda_{12} = U/k_B T$, $U = q_1 q_2 / 2r_0$ есть энергия электростатического взаимодействия частиц радиуса r_0 при их контакте друг с другом, q_1 и q_2 - заряды частиц. Заменяв электростатическую энергию U на работу фотофоретической силы U_{ph} при сближении частиц, получим

$$\lambda_{12} = U_{ph} / k_B T, U_{ph} = \int_{2r_0}^{\infty} F_{ph} ds \approx C / 2r, \quad (7)$$

где константа в выражении для зависимости фотофоретических сил от расстояния.

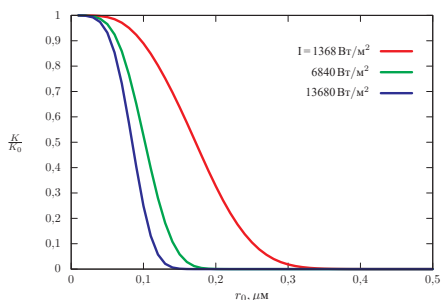


Рис. 3 — Отношение констант коагуляции в зависимости от размера частиц и интенсивности падающего на частицы видимого излучения

При заданном давлении оценку отношения констант коагуляции (Рисунок 3) имеет смысл проводить для ограниченного диапазона размеров частиц, верхняя граница которого приближённо определяется из условий, что при сближении частиц число Кнудсена системы должно быть, по крайней мере, больше 1, а величина силы фотофоретического взаимодействия существенно превышать силу тяжести, т.к., если величина этих сил становится сопоставимой, то существенную роль начинают играть силы вязкого взаимодействия, возникающие при седиментации частиц.

В заключении диссертации изложены итоги выполненного исследования, рекомендации, перспективы дальнейшей разработки темы. К итогам выполненного исследования относится следующее:

1. Разработана вероятностная модель, описывающая фотофоретическое взаимодействие в разреженной газовой среде между поглощающими излучение аэрозольными частицами или кластерами, состоящими из сферических частиц.
2. Разработан алгоритм генерации моделей аэрозольных кластеров, состоящих из сферических частиц.
3. Разработан детальный алгоритм решения задачи расчёта сил фотофоретического взаимодействия между аэрозольными частицами и кластерами на основе метода Монте-Карло и использования матриц переноса.
4. Предложена модификация алгоритма расчёта силы фотофоретического взаимодействия, позволяющая оценить влияние межмолекулярных столкновений на подавление фотофоретической силы.
5. Предложено решение задачи о влиянии фотофоретического взаимодействия сферических аэрозольных частиц на их коагуляцию.
6. Реализован предметно-ориентированный программно-алгоритмический комплекс (или комплекс проблемно-ориентированных программ) по оценке сил фотофоретического взаимодействия в разреженной газовой среде вакуумных камер и атмосферы Земли.
7. Проведены вычислительные эксперименты по исследованию сил фотофоретического взаимодействия, возникающих между аэрозольными

частицами и кластерами в разреженной газовой среде вакуумных камер и атмосферы Земли. Показано, что эти силы могут превосходить силу тяжести в десятки и даже сотни раз, в зависимости от размера частиц и расстояния между ними. Установлено, что для среднedisперсных и грубодисперсных частиц, хорошо поглощающих солнечный свет, фотофоретическое взаимодействие может снижать константу их коагуляции на несколько порядков величины.

Рекомендации и перспективы дальнейшей разработки темы в кратком изложении сформулированы следующим образом: 1) алгоритм генерации кластеров можно развить и на его основе построить новый алгоритм, с более совершенной процедурой присоединения новых частиц к кластеру. Тогда можно строить геометрические модели кластеров, которые более точно воспроизводят их реальную морфологию; 2) газокинетический подход, использованный в данной работе, можно было бы экстраполировать на ситуацию аэрозольных частиц в слабоионизированной низкотемпературной плазме; 3) представляет интерес проведение численного моделирования коагуляции аэрозольных частиц под воздействием света, т.е. с учётом фотофоретического отталкивания; 4) перспективной работой является реализация комплекса на языке программирования C++ для использования в многопроцессорных системах под управлением ОС Linux – типичных суперкомпьютерах.

Публикации автора по теме диссертации

1. *Черемисин, А. А.* Оценка фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц в стратосфере / А. А. Черемисин, А. В. Кушнаренко // Оптика атмосферы и океана. — 2010. — Т. 23, № 6. — С. 475—479.
2. *Cheremisin, A. A.* Photophoretic interaction of aerosol particles and its effect on coagulation in rarefied gas medium / A. A. Cheremisin, A. V. Kushnarenko // Journal of Aerosol Science. — 2013. — Vol. 62. — P. 26—39.
3. *Черемисин, А. А.* Фотофоретическое взаимодействие аэрозольных частиц и его влияние на коагуляцию в атмосфере / А. А. Черемисин, А. В. Кушнаренко // Оптика атмосферы и океана. — 2014. — Т. 27, № 12. — С. 1090—1098.
4. *Черемисин, А. А.* Оценка фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц в стратосфере / А. А. Черемисин, А. В. Кушнаренко // XVI Рабочая группа «Аэрозоли Сибири». — Томск, 2009. — С. 26.
5. *Кушнаренко, А. В.* Оценка фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц в стратосфере / А. В. Кушнаренко, А. А. Черемисин // XIII Международная ЭМ конференция по эвентологической математике и смежным вопросам. — 2009. — С. 114.
6. *Черемисин, А. А.* О фотофоретическом взаимодействии аэрозольных частиц. /

- А. А. Черемисин, А. В. Кушнаренко // Тезисы докладов VII Международной конференции «Естественные и антропогенные аэрозоли». — Санкт-Петербург : Изд-во СПбГУ, 2010. — С. 78.
7. *Черемисин, А. А.* Фотофоретическое взаимодействие аэрозольных частиц в атмосфере / А. А. Черемисин, А. В. Кушнаренко // XVIII Международный симпозиум «Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы». — Томск : Изд-во ИОА СО РАН, 2011. — С. D224—D227.
 8. *Черемисин, А. А.* Фотофоретическое взаимодействие аэрозольных частиц в средней атмосфере / А. А. Черемисин, А. В. Кушнаренко // Международный симпозиум «Атмосферная Радиация и Динамика» (МСАРД-2011). — С.-Петербург : Изд-во СПбГУ, 2011. — С. 131—132.
 9. *Cheremisin, A. A.* Photophoretic interaction of aerosol particles in rarefied gas medium / A. A. Cheremisin, A. V. Kushnarenko // European Aerosol Conference (EAC2011): EAC Proceedings. — England, Manchester, 2011. — 3F3—975.
 10. *Черемисин, А. А.* Фотофоретическое взаимодействие аэрозольных частиц в атмосфере возмущений / А. А. Черемисин, А. В. Кушнаренко // Тезисы докладов XIX международного симпозиума «Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы». — Томск : Изд-во ИОА СО РАН, 2013. — С. 113.
 11. *Черемисин, А. А.* Фотофоретическое взаимодействие аэрозольных частиц в атмосфере возмущений / А. А. Черемисин, А. В. Кушнаренко // Сборник докладов. XIX международный симпозиум «Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы». — Томск : Изд-во ИОА СО РАН, 2013. — С. D227—D230.
 12. *Черемисин, А. А.* Применение метода Монте-Карло для исследования динамики аэрозольных кластеров в разреженной газовой среде / А. А. Черемисин, А. В. Кушнаренко // Марчуковские научные чтения - 2018. — Новосибирск, 2018. — С. 41.
 13. *Kushnarenko, A. V.* Photophoretic interaction of aerosol particles in the Earth's atmosphere and its effect on coagulation / A. V. Kushnarenko, A. A. Cheremisin // Proceedings of International Symposium «Atmospheric radiation and dynamics (ISARD-2013)». — Saint-Petersburg : Saint-Petersburg State University, 2013. — P. 143.
 14. *Черемисин, А. А.* Параллельное моделирование фотофореза аэрозольных кластеров в разреженной газовой среде / А. А. Черемисин, А. В. Кушнаренко, Д. А. Кузьмин, С. В. Черников, И. С. Шнипов // Международный симпозиум «Атмосферная Радиация и Динамика». — Санкт-Петербург : Изд-во СПбГУ, 2015. — С. 180—181.
 15. *Черемисин, А. А.* Исследование фотофоретических явлений в разреженной газовой среде с помощью параллельных вычислений / А. А. Черемисин, Ю. В. Васильев, А. В. Кушнаренко, Д. А. Кузьмин, С. В. Черников // Сборник докладов. XXI Международный симпозиум «Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы». — Томск : Изд-во ИОА СО РАН, 2015. — С. D47—D48.