

Отзыв

официального оппонента на диссертационную работу Кушнарченко Андрея Викторовича «Разработка модели и алгоритмов расчёта фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц и кластеров в разреженной среде на основе метода Монте-Карло», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 — математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Актуальность темы исследования.

Диссертация Кушнарченко А. В. посвящена разработке математической модели фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц и кластеров в разреженной газовой среде. В качестве основы моделирования применен метод Монте-Карло. Модель включает в себя алгоритмы моделирования, комплекс проблемно-ориентированных программ и данные серии численных экспериментов.

Процессы коагуляции аэрозольных частиц широко распространены в природе и многих технологических применениях. В целом исследование таких процессов представляет собой сложную многофакторную нелинейную задачу тепломассо- и радиационного переноса. В диссертации Кушнарченко А. В. исследован один из таких факторов – фотофоретическое взаимодействие аэрозольных частиц, которое ранее практически не было описано в научной литературе. Вышесказанное и определяет весьма значительную актуальность тематики данной диссертационной работы.

Содержание диссертации.

Объём диссертации составляет 103 страницы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка использованных источников литературы из 93 наименований и приложения. Результаты, полученные в диссертации, являются новыми, опубликованы в 3 статьях в журналах из списка ВАК и 12 тезисах докладов на международных и российских конференциях. Также есть свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ по теме диссертации.

Первая глава является вводной к работе. В ней представлен обзор литературы, где приведены общие сведения о процессах коагуляции аэрозольных частиц. Далее обсуждены работы, в которых исследуются факторы, оказывающие влияние на коагуляцию. Отдельно рассмотрены работы о влиянии газокинетических явлений на коагуляцию аэрозольных частиц. В конце главы сформулированы физическая проблема и общие подходы к её решению.

Вторая глава посвящена вероятностной модели, описывающей фотофоретическое взаимодействие в разреженной газовой среде между поглощающими излучение аэрозольными частицами и кластерами сферических частиц. Сначала сформулированы физическая и геометрическая модели, затем построена вероятностная модель фотофоретического взаимодействия. Эта модель и специальные матрицы переноса положены в основу алгоритма численного расчёта сил фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц с такими же частицами и кластерами частиц. В этой главе также подробно рассмотрен алгоритм генерации моделей кластеров сферических частиц. В предпоследнем разделе предложена модификация алгоритма Монте-Карло, в которой реализуется простой способ вычисления интеграла столкновений молекул. Оценены границы применимости рассмотренного алгоритма при выходе за пределы свободномолекулярного режима. Глава завершается рассмотрением подхода к оценке влияния силы фотофоретического взаимодействия на константу коагуляции аэрозольных частиц.

В третьей главе представлен предметно ориентированный программно-алгоритмический комплекс, разработанный автором, с помощью которого выполнены все последующие численные эксперименты. В начале описан комплекс с его функциональными возможностями и пользовательским интерфейсом. Затем даётся оценка точности реализаций алгоритмов. В последнем разделе приводится сравнение с известной из литературы аналитической моделью квазисферической аэрозольной частицы. Подтверждена корректность газокинетической части алгоритма расчёта фотофоретической силы.

В четвёртой главе изложены результаты вычислительных экспериментов по исследованию силы фотофоретического отталкивания между аэрозольными частицами в вакуумных камерах и в атмосфере Земли.

Раздел 4.1 посвящён решению задачи для условий вакуумных аэрозольных камер. Сначала установлена зависимость силы фотофоретического

отталкивания для одинаковых сферических частиц от расстояния между частицами. При заданном давлении эта зависимость приближённо описывается как обратно пропорциональная квадрату расстояния между центрами частиц. Это говорит о дальнодействии сил фотофоретического отталкивания. Далее представлены зависимости силы от других параметров частиц и внешних условий: радиуса частиц, интенсивности падающего излучения, давления окружающей газовой среды. На основе модифицированного алгоритма метода Монте-Карло из предыдущей главы продемонстрировано влияние межмолекулярных столкновений на подавление силы фотофоретического отталкивания. Показано, что использование свободномолекулярного приближения можно считать оправданным, если число Кнудсена больше единицы. Два последних раздела посвящены численному эксперименту с частицами разных размеров. Сначала исследованы особенности влияния на силы фотофоретического отталкивания размеров частиц для случая их разного радиуса. А в конце приведены результаты расчётов фотофоретического взаимодействия отдельных сферических частиц и большого кластера, состоящего из 380 таких же сферических частиц. Показано, что имеет место асимметрия силы фотофоретического отталкивания и её величина зависит от направления, в котором частица приближается к кластеру.

В разделе 4.2 изложены результаты исследования фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц в атмосфере Земли. Представлены исследования фотофоретической силы для двух одинаковых сферических частиц в зависимости от их высоты в атмосфере Земли и их размеров в дневное и ночное время. Показано, что для ночного времени, когда солнечное излучение отсутствует, на высоте 50 км возникает смена знака силы и фотофоретическое отталкивание сменяется на притяжение.

Пятая глава посвящена оценке влияния фотофоретического отталкивания между аэрозольными частицами на их коагуляцию в вакуумных камерах и атмосфере Земли.

Исследовано влияние на константу коагуляции интенсивности видимого излучения, падающего на частицы, т. е. представлены оценки констант коагуляции с учётом фотофоретической силы для разных размеров частиц и разной интенсивности. Показано, что эффект фотофоретического взаимодействия

способен оказать существенное влияние на процесс коагуляции аэрозольных частиц.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в работе.

Достоверность и обоснованность полученных результатов и выводов.

Достоверность и обоснованность исследований и выводов определяется использованием современных методов численного статистического моделирования фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц и сравнением результатов моделирования отдельных аспектов проблемы с результатами других авторов, в частности, с имеющимися в литературе аналитическими расчётами.

Значимость полученных результатов для науки и практики.

Разработанные в диссертации подходы и алгоритмы позволяют проводить расчёт силы фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц в разреженной среде и дать оценку её влияния на коагуляцию. Это составляет практическую значимость работы. Разработанный предметно ориентированный программно-алгоритмический комплекс даёт возможность проведения вычислительных экспериментов для исследований широкого класса задач.

Результаты, представленные в данной работе, представляют интерес для специалистов, изучающих процессы, связанные с аэрозольными частицами. Такие исследования проводятся в Институте вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Институте химической кинетики и горения СО РАН, Институте теплофизики СО РАН, Институте оптики атмосферы СО РАН, Институте физики атмосферы РАН, Институте солнечно-земной физики СО РАН.

Замечания по тексту и оформлению диссертации.

1. Первое и, пожалуй, наиболее существенное замечание по тексту диссертации заключается в том, что ряд формул, наиболее важных для понимания сути работы, приведены без должных пояснений. Для примера формула на стр. 44, определяющая алгоритм вычисления так называемой матрицы переноса. По тексту: Матрицы переноса могут быть получены в результате оценки веса в статистическом моделировании

как математическое ожидание случайных величин ... Далее идет формула вычисления матрицы переноса. Во-первых, о каком весе идет речь? В упомянутой формуле он никак не присутствует. Во-вторых, каков физический смысл этой матрицы переноса? Под знаком суммы в квадратных скобках стоят разницы проекций единичных векторов направлений входа молекул газа внутрь опорной сферы и выхода из нее на локальной оси координат. К сожалению, пояснений нет.

2. На следующей странице приведена основополагающая формула (2.10) для вычисления фотофоретической силы, в которую входит вышеупомянутая матрица переноса. Формула сложная. В ней искомая сила зависит от температуры невозмущенного газа и температуры молекул, испытавших столкновения с частицами аэрозоля. Формула не очевидная, но приведена без вывода и без ссылки на работы, из которых эта формула заимствована.
3. Подобные замечания касаются и формул, представленных на стр. 39, которые так же приведены без ссылок на литературу. В частности, например, формула (2.6), определяющая распределение по скоростям в потоке молекул с температурой T содержит в числителе и знаменателе одну и ту же величину v , но почему-то она не сокращена. Без пояснений трудно понять, в чем здесь дело.
4. В тестовых расчетах для частиц типа сажи на стр. 46 и 67 плотность материала частиц была взята равной 1000 кг/м^3 . Нам кажется, что это слишком плотная упаковка, которая не может реализоваться в природе.
5. На рис. 3.10 (стр. 68) приведены графики зависимости фотофоретической силы от давления для семи разных размеров частиц. Но приведенные данные показывают, что для всех размеров частиц фотофоретические силы являются константами, не зависящими от давления.

Все приведенные выше замечания носят скорее не смысловой, а редакционный характер. Очевидно, что автор хорошо ориентируется в данном материале, но для стороннего читателя, пытающегося разобраться и, возможно, использовать алгоритмы для своих целей, отсутствие пояснений затрудняет чтение диссертации. В целом можно утверждать, что данная работа является

весомым вкладом в исследование процессов коагуляции аэрозольных частиц в потоках разреженного газа.

Заключение

Представленная работа является завершённой научно-квалификационной работой и выполнена на высоком научном уровне. Представленные в работе исследования обладают научной новизной и достоверностью, все полученные выводы научно обоснованы. Основные положения диссертации достаточно полно освещены в научных публикациях автора, прошли апробацию на конференциях и семинарах ИКИТ СФУ, ИВМ и МГ СО РАН и ИОА СО РАН. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Считаю, что диссертация Кушнаренко А. В. соответствует требованиям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 — математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Официальный оппонент

Заведующий лабораторией стохастических задач ИВМ и МГ СО РАН, д.ф.-м.н. по специальности 25.00.29 – физика атмосферы и гидросферы, профессор кафедры вычислительной математики механико-математического факультета Новосибирского государственного университета

Б. А. Каргин

Подпись д.ф.-м.н. Каргина Б. А. заверяю
Ученый секретарь ИВМ и МГ СО РАН



Каргин Борис Александрович

Заведующий лабораторией стохастических задач

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук (ИВМ и МГ СО РАН)

Адрес: проспект Академика Лаврентьева, 6, г. Новосибирск, 630090

р.т. 8(913)941-07-73, E-mail: bkargin@osmf.sccc.ru

18.10.2019