

## 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, представленная Кушнарченко А. В., посвящена разработке алгоритмов метода Монте-Карло и предметно-ориентированного комплекса программ для расчёта фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц в разреженной среде и численному исследованию фотофоретического взаимодействия.

Исследование закономерностей коагуляции аэрозольных частиц имеет фундаментальное значение для широкого круга научных и прикладных задач. Теоретически и экспериментально установлено, что на процесс коагуляции влияет множество факторов. К таким факторам относятся начальный дисперсионный состав, градиент температуры окружающей газовой среды, влажность, наличие между аэрозольными частицами сил взаимодействия, присутствие в газовой среде звуковых волн, турбулентность, внешние силы, воздействие света. Воздействие света на коагуляцию аэрозольных частиц является одним из сложных процессов формирования аэродисперсных систем. Известно, что на одиночные аэрозольные частицы в разреженной газовой среде, если на их поверхность падает свет, могут действовать силы, меняющие механическое поведение частиц. В настоящее время наблюдается повышенный интерес к численному моделированию коагуляции аэрозольных частиц. Это связано с широким распространением этого процесса в природе и технике, в частности, в нанотехнологиях, в методах борьбы с загрязнением атмосферы. Представленная работа посвящена численному исследованию влияния фотофоретических сил на процессы коагуляции в условиях разреженной газовой среды. Использование для расчетов метода Монте-Карло позволяет учесть стохастическую природу среды. Дополнительным плюсом

использования метода Монте-Карло является возможность эффективного распараллеливания расчётов для решения задач с необходимой точностью.

Таким образом актуальность представленной работы не вызывает сомнений.

### **Обоснованность научных положений, выводов и рекомендаций.**

Автором разработаны численные алгоритмы для расчёта фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц в разреженной газовой среде, на их основе реализован комплекс проблемно-ориентированных программ и проведены численные эксперименты по исследованию величины этих сил и их влияния на процесс коагуляции аэрозольных частиц. В ходе изучения рассматриваемых методов диссертантом проведен большой объём вычислительной работы. Также проведен большой объём работы по анализу достоинств и недостатков рассматриваемых алгоритмов и поиску оптимальных путей их реализации. Проведена апробация рассматриваемых алгоритмов путем сравнения с имеющимися в литературе данными.

### **Достоверность и новизна исследования, полученных результатов, выводов и рекомендаций.**

Диссертация объёмом 103 страницы включает введение, 5 глав основного содержания, заключение, список использованных источников из 93 наименований и приложение. Результаты, полученные в диссертации, являются новыми, опубликованы в 3 журнальных статьях автора (журналы включены в список ВАК) и 12 тезисах докладов. Имеется свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ, созданной по теме диссертации. Результаты работы были представлены на международных и российских конференциях.

Первая глава посвящена обзору литературы и описанию рассматриваемой физической проблемы. В ней приведены общие сведения о процессе коагуляции аэрозольных частиц, модель коагуляции с учётом взаимодействия аэрозольных частиц, дан обзор работ, посвящённых факторам, оказывающим влияние на процесс коагуляции. Особое внимание уделено сведениям о влиянии га-зокинетических явлений на коагуляцию аэрозольных частиц, в частности

фотофореза. Глава завершается описанием рассматриваемой далее в работе физической проблемы и формулировкой подходов к её решению.

Вторая глава посвящена разработке вероятностной модели, описывающей фотофоретическое взаимодействие в разреженной газовой среде между поглощающими излучение аэрозольными частицами, а также кластерами, состоящими из нескольких сферических частиц. В ней приведена физическая постановка задачи и построена вероятностная модель рассматриваемого процесса. На основе этой вероятностной модели сформулирован алгоритм метода Монте-Карло, основанный на предположении, что молекулы газа не сталкиваются между собой (свободномолекулярный режим). Для проверки применимости свободномолекулярного подхода при решении рассматриваемой задачи предложен модифицированный алгоритм метода Монте-Карло, позволяющий оценить влияние межмолекулярных столкновений на силу фотофоретического взаимодействия. Кроме того, сформулирован алгоритм построения кластерных систем, состоящих из сферических частиц.

Третья глава посвящена разработанному для проведения численных экспериментов предметно-ориентированному программно-алгоритмическому комплексу. В ней представлены исходная концепция разработки комплекса и подробное описание его функциональных возможностей. Здесь же приведены результаты численного анализа относительной точности расчетов фотофоретической силы построенным алгоритмом метода Монте-Карло. Глава завершается разделом, посвященным верификации алгоритма. В нём проведено сравнение аналитических расчётов фотофоретической силы для известной модели квазисферической аэрозольной частицы с численными расчётами, полученными в рамках разработанного комплекса программ. Получено хорошее совпадение значений относительной фотофоретической силы в случае проведения расчетов без учета инфракрасного (ИК) излучения. При включении в расчет ИК излучения хорошее совпадение получено для частиц размером порядка микрона и меньше для всего рассматриваемого диапазона давлений. Для более крупных частиц наблюдается расхождение значений в диапазоне низких давлений, что объясняется различием моделей учёта ИК излучений.

В четвёртой главе представлены результаты численных экспериментов, посвященных исследованию силы фотофоретического отталкивания между

аэрозольными частицами в вакуумных камерах и в атмосфере Земли. Была выполнена обширная программа по оценке влияния различных параметров на величину фотофоретической силы. На первом этапе был выполнен цикл исследований для сферических частиц одинакового радиуса в условиях, соответствующих вакуумным камерам. Показано, что при заданном давлении зависимость силы от расстояния между центрами частиц приближённо описывается зависимостью кулоновского типа. При таком характере зависимости силы от расстояния, её можно отнести к типу дальнодействующих сил. Представлены зависимости силы от размера частиц, от интенсивности падающего излучения и от давления окружающей газовой среды. Проведён модельный расчёт для оценки влияния межмолекулярных столкновений на величину фотофоретической силы. Показано, что использование свободномолекулярного приближения можно считать оправданным, если число Кнудсена больше единицы. Кроме того, проведены исследования влияния на величину силы размеров частиц для случая частиц разного радиуса. В качестве иллюстрации возможностей комплекса представлены результаты расчёта сил фотофоретического отталкивания, действующих на свободные частицы со стороны кластера, состоящего из 380 сферических частиц.

Для условий, соответствующих атмосфере Земли, проведены исследования фотофоретической силы для двух одинаковых сферических частиц в зависимости от их высоты расположения и их размеров в дневное и ночное время.

Пятая глава посвящена оценке влияния фотофоретического взаимодействия на константу коагуляции аэрозольных частиц. В главе представлены оценки констант коагуляции с учетом фотофоретической силы для разных размеров частиц и разной интенсивности излучения. Показано, что эффект фотофоретического взаимодействия способен оказать существенное влияние на процесс коагуляции аэрозольных частиц.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в работе.

### **Значимость для науки и практики полученных результатов.**

Практическая значимость работы состоит в том, что разработанные в диссертации подходы и алгоритмы обеспечивают возможность эффективно-

го расчёта силы фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц в разреженной среде. Разработан предметно-ориентированный программно-алгоритмический комплекс, предоставляющий широкие возможности для проведения численных исследований для рассматриваемого класса задач.

Представленные результаты будут интересны специалистам, изучающим процессы, связанные с аэрозольными частицами, в частности, сотрудникам ИВМиМГ СО РАН, ИТ СО РАН, ИОА СО РАН, ИКИТ СФУ, ИФА РАН, ИХКГ СО РАН, ИСЗФ СО РАН, НИФХИ и других научных учреждений, исследования которых связаны с изучением аэрозольных частиц и, в частности, с их коагуляцией.

### **Достоинства и недостатки в содержании и оформлении диссертации.**

Отметим, что автор уделил большое внимание подготовке текста и оформлению диссертации. В тексте диссертации присутствуют опечатки, но их количество незначительно. Изложение анализа и объяснения выбора параметров численных экспериментов представляется в ряде случаев слишком сжатым.

По представленному тексту имеется ряд замечаний:

1) Диссертантом проведен анализ относительной точности расчетов фотофоретической силы реализованным алгоритмом метода Монте-Карло (третья глава). Однако, при использовании метода Монте-Карло также желательна оценка уровня статистической погрешности через дисперсию.

2) Коэффициент аккомодации играет существенную роль в процессе фотофоретического взаимодействия. Понятно, что данных о точных значениях коэффициента аккомодации в случае аэрозольных частиц фактически не имеется. Поэтому анализ влияния коэффициента аккомодации на исследуемые процессы представляется полезным.

3) Слишком кратко изложен анализ влияния на результаты моделирования радиуса опорной сферы.

Тем не менее, указанные замечания не снижают уровень диссертации. Оценивая диссертацию в целом, можно констатировать, что она является реальным вкладом в развитие теории коагуляции аэрозольных частиц. Полученные диссертантом результаты позволяют сделать вывод о возможности

эффективного использования методов статистического моделирования для решения рассматриваемого класса задач.

### 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 ряде конференций. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Считаю, что диссертация Кушнарченко 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, кандидат физико-математических наук по специальности 01.01.07 – вычислительная математика, старший научный сотрудник лаборатории разреженных газов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук

Россия, 630090, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, д. 1.

E-mail: plotnikov@itp.nsc.ru, телефон: +7(383)3356245.

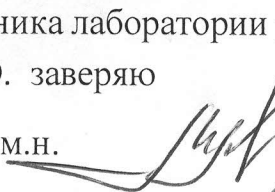


Михаил Юрьевич Плотников

08 октября 2019

Подпись старшего научного сотрудника лаборатории разреженных газов ИТ СО РАН к.ф.-м.н. Плотникова М.Ю. заверяю

Ученый секретарь ИТ СО РАН к.ф.-м.н.



М.С. Макаров

