

УТВЕРЖДАЮ

Директор Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института оптики атмосферы им.

В. Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук



д.ф.-м.н. И. В. Пташник

«03» октября 2019 г

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу Кушнарченко Андрея Викторовича «Разработка модели и алгоритмов расчёта фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц и кластеров в разреженной газовой 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 выполненной работы. Диссертационная работа Кушнарченко А.В. посвящена изучению с помощью методов математического моделирования газокинетического взаимодействия сферических аэрозольных частиц, поглощающих свет, в разреженной газовой среде – фотофоретического взаимодействия.

Используя приближение свободномолекулярного режима, метод Монте-Карло и методику, предложенную руководителем работы, А. А. Черемисиным, автор построил вероятностную модель этого взаимодействия. Эту вероятностную модель и алгоритмы на основе метода Монте-Карло он реализовал в специальном программно-алгоритмическом проблемно-ориентированном комплексе, с помощью которого провёл вычислительные эксперименты и показал, что фотофоретическое взаимодействие может оказывать влияние на коагуляцию аэрозольных частиц, хорошо поглощающих видимое излучение.

Задачи выявления, описания и моделирования факторов, которые оказывают влияние на коагуляцию аэрозолей являются актуальными ввиду распространённости и важности этого процесса в технологических применениях и в природе. Так, например, хорошо известно, что аэрозольная компонента в атмосфере Земли играет существенную роль в формировании климата и в глобальных климатических изменениях, наблюдаемых ныне. Коагуляция, как причина укрупнения аэрозольных частиц, влияет на время присутствия частиц в атмосфере, их подвижность, оптические свойства, динамические характеристики, стратификацию. Соответственно, очень важно учитывать и изучать все факторы, которые могут повлиять на их коагуляцию. Явление фотофореза в общем и

фотофоретическое взаимодействие, в частности, являются такими факторами. Также следует отметить, что в последнее время возрос интерес к аэрозольным геоинженерным проектам стабилизации современного климата, путём искусственного внесения больших масс аэрозоля в тропосфере Земли. Оценка времени жизни искусственного аэрозоля, его стратификации, влияние фотофоретического взаимодействия на эти параметры, несомненно, представляет интерес и может быть оценено с помощью алгоритмов, подходов и программного комплекса, представленных в диссертационной работе Кушнарченко А. В.

Таким образом, научная проблема, которой посвящена диссертационная работа Кушнарченко А. В. является актуальной, а значимость полученных автором диссертации результатов для развития соответствующей отрасли науки очевидна.

Общая характеристика работы.

Работа состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы и приложения.

Во введении разъясняется актуальность проведённого исследования, представлена цель диссертации, поставлены задачи, показана научная новизна, практическая и теоретическая значимость, разъяснён личный вклад соискателя, изложены положения, которые выносятся на защиту.

Первая глава начинается как обзор литературы, посвящённый исследованию вопроса о том, что известно на сегодняшний день о влиянии на коагуляцию аэрозольных частиц со стороны газокINETических явлений. Рассмотрены работы о влиянии на коагуляцию термофореза. В конце главы сформулирована физическая проблема.

Во второй главе подробно описана вероятностная модель фотофоретического взаимодействия. Соответственно сначала сформулированы физическая и геометрическая модели. Затем подробно описана используемая максвелловская зеркально-диффузионная схема взаимодействия молекул с разогретыми телами. Разъяснены значение и смысл коэффициента аккомодации как характеристики эффективности переноса молекулами тепла. В основе вероятностной модели лежит идея о том, что нет необходимости прямого моделирования движения молекул по аэрозольной системе и прямого подсчёта передаваемого ими импульса. Достаточно построить вероятностно эквивалентную модель на основе представления движения молекулы как однородной обрывающейся цепи Маркова и, применив метод Монте-Карло, смоделировать пространственные траектории молекулярных пучков. Используя приближение свободномолекулярного режима, методику, описанную в работе А.А. Черемисина, и матрицы переноса можно реализовать алгоритмы расчётов существенно проще, снизив порядок задачи. Далее подробно описаны сам алгоритм статистического моделирования на основе метода Монте-Карло, уравнение теплового баланса и модель учёта потоков излучений, геометрическая модель и алгоритм генерации аэрозольных кластеров, алгоритм поиска пересечений молекулярных траекторий и сферических поверхностей. Затем обсуждается подход, благодаря которому можно оценить влияние межмолекулярных столкновений на силу фотофоретического взаимодействия. И в конце обсуждается подход к оценке влияния фото-

форетического взаимодействия на коагуляцию аэрозольных частиц. Предлагается использовать классический подход Н.А. Фукса к оценке влияния заряда частиц на коагуляцию, заменив электростатический потенциал на работу фотофоретической силы.

Третья глава рассказывает о предметно-ориентированном программно-алгоритмическом комплексе, в котором реализованы все модели и алгоритмы, а также необходимые функции для проведения вычислительного эксперимента. Описан его пользовательский интерфейс, функциональные возможности, дана оценка сложности по времени алгоритму статистического моделирования, отдельный раздел посвящён обсуждению точности расчётов. Глава завершается верификацией реализаций алгоритмов путём сравнения с аналитическими расчётами по известным, опубликованным моделям. Установлено, что газокинетическая часть исполняется верно, а различия обусловлены разностью в моделях учёта потоков излучений.

В **четвёртой главе** изложены результаты вычислительных экспериментов по изучению силы фотофоретического отталкивания между аэрозольными частицами. Она разделена на две части: первая часть исследований в условиях вакуумных аэрозольных камер и вторая часть в условиях атмосферы Земли. Основные результаты этой главы заключаются в следующем:

1. Сила фотофоретического взаимодействия двух одинаковых сферических аэрозольных частиц убывает обратно пропорционально квадрату расстояния между их центрами.
2. Максимальная величина фотофоретической силы отталкивания может превышать силу тяжести, действующую на частицу, на 1-2 порядка. Это зависит от размера частиц.
3. Выход за пределы свободно молекулярного режима сопровождается подавлением силы фотофоретического отталкивания, но вплоть до значения числа Кнудсена системы равного 1 это подавление незначительно.
4. Большой кластер и отдельные сферические частицы взаимодействуют с явно выраженной асимметрией. Сила фотофоретического отталкивания частиц от кластера по величине зависит не только от расстояния до него, но и от стороны, к которой они приближаются к кластеру.
5. В ночных условиях атмосферы Земли на высоте около 50 наблюдается смена знака силы и фотофоретическое становится притяжением. Причиной этого служит радиационное выхолаживание частиц.

Пятая глава посвящена исследованию влияния фотофоретического отталкивания между аэрозольными частицами на их коагуляцию в вакуумных камерах и атмосфере Земли. Используется классический подход Н. А. Фукса к учёту влияния потенциала взаимодействия на константу коагуляции частиц. Рассчитав потенциал фотофоретической силы, можно оценить влияние на коагуляцию, получив отношение константы коагуляции с взаимодействием к константе коагуляции без такового. Расчёты показывают, что для ультрадисперсных частиц фотофоретическое взаимодействие практически не снижает константу коагуляции, несмотря на её огромную величину по сравнению с силой

тяжести. В тоже время для частиц, радиус которых от 0,2 микрон и более наблюдается заметное снижение константы коагуляции, еще более возрастающее при увеличении интенсивности падающего на частицы видимого излучения.

В заключении сформулированы основные результаты работы и обозначены перспективы её развития

Публикации. Представленные соискателем научные результаты в полной мере опубликованы в 3 научных работах, все из которых входили список в журналов, рекомендованных ВАК для представления результатов кандидатский диссертаций на момент их выхода в печать. Также соискатель имеет свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ (программно-алгоритмического комплекса проблемно-ориентированных программ, представленного в диссертации) №2013612189, приравняемого к дополнительной публикации из списка ВАК.

Новизна исследования и результатов.

1. Вероятностная модель фотофоретического взаимодействия в разреженной газовой среде между аэрозольными частицами и кластерами, состоящими из сферических частиц, с учётом поглощения и излучения ими лучистой энергии.
2. Алгоритм решения задачи расчёта сил фотофоретического взаимодействия между аэрозольными частицами, частицами и кластерами на основе метода Монте-Карло. Разработан комплекс проблемно-ориентированных программ, где реализован этот и другие алгоритмы.
3. Результаты комплексного вычислительного эксперимента, в которых показано: что между аэрозольными частицами микронного и субмикронного размера могут возникать фотофоретическое отталкивание с силой 10 – 100 величин силы тяжести даже при интенсивности падающего излучения равного солнечной константе; эти силы убывают обратно пропорционально квадрату расстояния между центрами частиц; в случае субмикронных сажеподобных частиц, которые хорошо поглощают видимое солнечное излучение, фотофоретическое взаимодействие способно понизить константу их коагуляции на несколько порядков.

Теоретическая значимость заключается в том, что показано, что на основе метода Монте-Карло можно разработать алгоритмы и комплексы программ по исследованию газокинетических явлений в аэрозольных системах. Выявлен новый фактор влияния на коагуляцию среднedisперсных и грубодисперсных аэрозольных частиц, хорошо поглощающих видимое излучение.

Практическая значимость работы заключается в том, что создан комплекс программ, в котором можно проводить оценку влияния освещения на коагуляцию аэрозольных частиц.

Обоснованность и достоверность работы обеспечена правильным и последовательным применением методов математического и статистического моделирования, верификацией полученных программ через сопоставление тестовых расчётов с известными опубликованными аналитическими расчётами. Результаты работы докладывались на 12

международных, всероссийских и региональных конференциях, одна из которых European Aerosol Conference 2011 года.

Соответствие паспорту научной специальности. Диссертационная работа соответствует паспорту научной специальности 05.13.18 – «математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» и отвечает формуле специальности по следующим пунктам областей исследования:

Пункт 3. Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий.

Пункт 4. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента.

Пункт 5. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.

Пункт 8. Разработка систем компьютерного и имитационного моделирования

Замечания по диссертационной работе.

1. В разделе Приложения в диссертации приведена копия свидетельства на программу для ЭВМ. Такое свидетельство, как нам известно, приравнивается к публикации из списка ВАК, однако в списке таковых во введении оно не значится, а указаны лишь печатные работы.
2. В разделе введения о научной новизне, в пункте 3, на наш взгляд, было бы лучше сформулировать со словом «впервые»: «*впервые* показано, что силы фотофоретического отталкивания ...», «*впервые* установлено, что силы убывают обратно пропорционально квадрату расстояния между центрами частиц», «*впервые* установлено, что ... снижают константу коагуляции» и т. д.
3. На странице 12, абзац 3, второе предложение опечатка. Вместо предлога «в» стоит союз «а» после «... изучить фотофоретическое взаимодействие ...»
4. На странице 14, в п. 3 списка «всякое столкновение приводит к *слипанию*». Это опечатка, слова «слипанию».
5. На странице 87, во втором абзаце раздела 5.1. в приложении «Участок от ... до бесконечности» после слова «зная» стоит знак «?». Очевидно, это опечатка.

Заключение о диссертационной работе

Диссертационная работа Кушнарченко А. В. «Разработка модели и алгоритмов расчёта фотофоретического взаимодействия аэрозольных частиц и кластеров в разреженной газовой среде на основе метода Монте-Карло» была обсуждена и получила положительную оценку на заседании семинара.

Диссертация Кушнарченко Андрея Викторовича является законченной научно-квалификационной работой по актуальной теме в области моделирования газокинетических явлений в аэрозольных системах. Положения, выносимые на защиту, сформулированы отчетливо. Полученные результаты и выводы обоснованы, являются новыми,

имеют научное и прикладное значение и полностью отражены в публикациях автора. Автореферат диссертации соответствует ее содержанию. Указанные выше замечания не снижают положительную оценку представленной работы. Содержание диссертации полностью соответствует паспорту специальности 05.13.18 - «математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Работа удовлетворяет всем требованиям Высшей аттестационной комиссии Российской Федерации, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Соискатель Кушнарченко Андрей Викторович заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18.

Отзыв обсуждён и одобрен на заседании семинара отделения лазерного зондирования атмосферы ИОА СО РАН 03.10.2019 г., протокол №3

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук (ИОА СО РАН)
Российская Федерация, 634055, Россия, г. Томск, площадь Академика Зуева, 1.

Телефон: 8 (3822) 492738

Факс: 8 (3822) 492086

Адрес электронной почты:

официальный адрес: contact@iao.ru

директор: director@iao.ru

ученый секретарь: science@iao.ru

Адрес официального сайта в сети интернет: <https://www.iao.ru/>

Отзыв составила секретарь семинара, старший научный сотрудник центра лазерного зондирования атмосферы ИОА СО РАН, к.ф.-м.н. по специальности 01.04.05 «Оптика»

Харченко Ольга Викторовна

Ведущий семинара заведующий отделением лазерного зондирования атмосферы ИОА СО РАН, старший научный сотрудник, д.ф.-м.н. по специальности 01.04.05 «Оптика»
Матвиенко Г. Г.

Матвиенко Геннадий Григорьевич

Подписи Харченко Ольги Викторовны и Матвиенко Геннадия Григорьевича заверяю.
Учёный секретарь Института оптики атмосферы им. В. Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук, кандидат физико-математических наук Тихомирова Ольга Владимировна



«03» октября 2019 г.