

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Уральский федеральный университет имени
первого Президента России Б. Н. Ельцина»

На правах рукописи



Сограби Тимур Вагидович

РОЛЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГАЗА С ПОВЕРХНОСТЬЮ
АЭРОЗОЛЬНОЙ ЧАСТИЦЫ В ЕЕ ДВИЖЕНИИ ПРИ
БОЛЬШИХ ЧИСЛАХ КНУДСЕНА

1.3.14. Теплофизика и теоретическая теплотехника

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена на кафедре физики конденсированного состояния и наноразмерных систем Института естественных наук и математики ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор,
Черняк Владимир Григорьевич

Официальные оппоненты: **Токманцев Валерий Иванович**,
доктор технических наук, доцент, ФГАОУ
ВО «Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельци-
на», г. Екатеринбург, заведующий кафедрой
технической физики Физико-технологическо-
го института;

Зарипов Шамиль Хузеевич,
доктор физико-математических наук, профес-
сор, ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский)
федеральный университет», г. Казань, заве-
дующий кафедрой моделирования экосистем
Института экологии и природопользования;

Маркелов Юрий Иванович,
кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник, ФГБУН Ин-
ститут промышленной экологии уральского
отделения Российской академии наук, г.
Екатеринбург, заведующий лабораторией
эколого-климатических проблем Арктики.

Защита состоится «03» марта 2023 г. в 15:00 часов на заседании диссер-
тационного совета УрФУ 1.3.02.06 по адресу: 620002 г. Екатеринбург, ул.
Мира, 19, ауд. И-420 (зал Ученого совета).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина»

<https://dissovet2.urfu.ru/mod/data/view.php?id=12&rid=4283>

Автореферат разослан «___» _____ 2023 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета



Ищенко Алексей Владимирович

Общая характеристика работы

Актуальность темы

Научные исследования в области физики аэрозолей стимулируются большим разнообразием актуальных проблем, связанных с атмосферными явлениями, медициной и промышленным производством.

Силы, действующие на макроскопическую частицу в неоднородном газе, в существенной степени определяются характером взаимодействия молекул с ее поверхностью. Выявление роли этого взаимодействия в движении частицы и ее теплообмене с газовой средой расширит понимание физической природы явлений переноса в аэрозолях, позволит более точно прогнозировать осаждение аэрозолей в фильтрах различных типов, а в перспективе и влиять на эффективность этого процесса. Актуальность такой теории связана также с тем, что сравнение ее с экспериментальными результатами для модельных частиц, поверхность которых можно готовить и контролировать, будет стимулировать разработку новых моделей ядра рассеяния.

Степень разработанности темы

Систематические целенаправленные исследования сил, действующих на аэрозольную частицу, в зависимости от характера взаимодействия молекул газа с ее поверхностью до настоящего времени не проводились. В большинстве теоретических работ использовалось приближение полной аккомодации молекул газа на поверхности частицы независимо от рода газа и поверхности. В ряде работ принималась или максвелловская модель зеркально-диффузного отражения молекул на поверхности частицы, или какая-либо эвристическая модель функции распределения скоростей отраженных молекул. Результаты такого подхода часто не соответствуют экспериментальным данным, а иногда оказываются противоречивыми. Решение этой проблемы возможно, если следовать положению кинетической теории газов о том, что функция распределения скоростей отраженных молекул должна не задаваться, а вычисляться через вероятность рассеяния (ядро рассеяния) и функцию распределения налетающих на поверхность молекул. Факт отсутствия такого подхода в задачах микрофизики аэрозолей связан, прежде всего, с трудностями разработки моделей ядра рассеяния, что является самостоятельным направлением исследований в динамике разреженного газа.

Объект исследования. Химически однородная сферическая частица, взвешенная в неоднородном по температуре и концентрации компонентов газе, а также находящаяся в поле оптического излучения.

Предмет исследования. Роль взаимодействия молекул газа с поверхностью частицы в величинах действующих на неё сил и скоростей движения в неоднородных по температуре и концентрации газам, а также в поле оптического излучения.

Целью работы является:

- разработка физико-математической модели силы сопротивления, термофоретического, фотофоретического и диффузиофоретического движения сферической аэрозольной частицы в условиях свободномолекулярного и почти свободномолекулярного режимов при любом ядре рассеяния;
- численный расчет этих величин с использованием нескольких известных моделей ядра рассеяния при различных значениях аккомодационных параметров моделей;
- сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными и определение численных значений аккомодационных параметров моделей ядра рассеяния.

Научная новизна диссертационной работы состоит в следующем:

1. Разработаны физико-математические модели силы сопротивления, термофоретической силы и скорости движения аэрозольной частицы в почти свободномолекулярном режиме, фотофореза и диффузиофореза в свободномолекулярном режиме при произвольном ядре рассеяния.
2. Проведены аналитические и численные расчеты сил, действующих на частицу в неоднородных газах, и скоростей ее движения с использованием известных моделей ядра рассеяния в зависимости от аккомодационных параметров этих моделей. Сделан сравнительный анализ полученных результатов.
3. На основе сравнения теории с экспериментальными данными проведена оценка эффективности использованных моделей ядра рассеяния и извлечены численные значения аккомодационных параметров моделей. Показано, что изучение сил и скоростей движения частиц в неоднородных газах является источником достоверной информации о взаимодействии газа с поверхностью.

Теоретическая и практическая значимость. Полученные в диссертационном исследовании результаты могут быть полезны для прогнозирования распространения аэрозолей (в том числе вирусов) в атмосфере, для более полного анализа результатов лазерного мониторинга атмосферы, для оптимизации процессов сепарации и осаждения аэрозольных частиц в термопреципитаторах и диффузионных фильтрах.

Полученные выражения для сил и скоростей движения аэрозольных частиц позволяют провести вычисление этих величин для любой модели ядра рассеяния, как известной, так и той, которая будет разработана в будущем.

Разработанные теоретические модели будут стимулировать новые экспериментальные исследования в области физики аэрозолей и в области взаимодействия газа с поверхностью.

Методология и методы исследования. В основе теории ли-неаризованное кинетическое уравнение для функции распределения с ашпроксимирующим интегралом столкновений. Функция распределения отраженных на поверхности частицы молекул определялась интегральным соотношением через ядро рассеяния и функцию распределения налетающих на поверхность молекул. С учетом этого граничного условия кинетическое уравнение записано в интегральной форме. Представлен итерационный метод решения этого уравнения при больших числах Кнудсена Kn (отношения средней длины свободного пробега молекул газа к радиусу частицы). Результаты получены в первом приближении с учетом членов порядка Kn^{-1} .

Положения, выносимые на защиту:

1. Физико-математические модели силы сопротивления, силы и скорости термофореза аэрозольной частицы в почти свободномолекулярном режиме, фотофоретической и диффузионной сил в свободномолекулярном режиме при любом ядре рассеяния.
2. Результаты расчета сил, действующих на аэрозольную частицу, и скоростей её движения с использованием известных моделей ядра рассеяния при различных значениях аккомодационных параметров этих моделей.
3. Разработанная теория действующих на аэрозольную частицу сил при сравнении с экспериментальными данными позволяет оценить реалистичность и эффективность модели ядра рассеяния и является источником достоверной информации о значениях ее аккомодационных параметров.

Достоверность полученных результатов обеспечена адекватностью используемых физических представлений, подтверждается согласием с результатами других авторов в случае полной аккомодации и количественным согласием теории с экспериментальными данными.

Апробация работы. Основные результаты диссертации доклады-вались и обсуждались на представительных научных конференциях и симпозиумах: European Aerosol Conference EAC 2019 (Gotheborg, Sweden), Международная XXVI конференция «Аэрозоли Сибири» 2019 (Томск, Россия), Международный симпозиум «Оптика Атмосферы и Океана» 2020 (онлайн), Международная XXVII конференция «Аэрозоли Сибири» 2020 (онлайн), European Aerosol Conference EAC 2020 (online), RGD32 pre-workshop 2021 (online).

Публикации. По теме исследования опубликовано 9 научных работ, в том числе 4 статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, определенных ВАК РФ и аттестационным советом УрФУ и входящих в международные базы цитирования Scopus и Web of Science.

Личный вклад автора заключается в обсуждении и формулировке идей и методов исследования, проведении численных расчетов, описании

полученных результатов, формулировке основных выводов исследования, подготовке публикаций.

Соответствие паспорту специальности. Диссертационная работа соответствует паспорту научной специальности 1.3.14 Теплофизика и теоретическая теплотехника в области физико-математических наук в части пунктов:

1. Фундаментальные, теоретические и экспериментальные исследования молекулярных и макросвойств веществ в твердом, жидком и газообразном состоянии для более глубокого понимания явлений, протекающих при тепловых процессах и агрегатных изменениях в физических системах.
4. Неоднородные аэродисперсные системы.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения и 1 приложения. Полный объем диссертации составляет 123 страницы, включая 37 рисунков и 14 таблиц. Список литературы содержит 105 наименований.

Основное содержание работы

Во введении обосновывается актуальность выбранной темы диссертационного исследования, характеризуется степень ее разработанности, определяются цели и задачи, осуществляется выбор предмета и объекта исследования. Формулируются положения, выносимые на защиту.

В первой главе введены определяющие безразмерные критерии движения макроскопических тел в газах, критерий связи закономерностей движения отдельной аэрозольной частицы и свойств аэродисперсной системы в целом.

Приведено кинетическое уравнение с аппроксимирующим интегралом столкновений третьего порядка (S-модель) [1] и граничное условие, устанавливающее связь между функциями распределения отраженных и налетающих на поверхность молекул. Это условие представляет собой интеграл по скоростям налетающих на поверхность молекул; подынтегральное выражение включает ядро рассеяния [2; 3].

В общем случае ядро рассеяния зависит от рода газа и поверхности, их физического состояния, структуры поверхности на макро- и микроуровнях. Моделирование ядра рассеяния является самостоятельным разделом динамики разреженного газа и в настоящее время находится в стадии разработки.

Для количественных оценок сил, действующих на частицу, использовались следующие наиболее известные модели ядра рассеяния:

1. Максвелловская модель зеркально-диффузного отражения [4], которая предполагает, что доля ϵ молекул рассеивается стенкой

диффузно, т. е. равновероятно во всех направлениях с максвелловской функцией распределения, а доля $(1 - \varepsilon)$ отражается зеркально. Коэффициент диффузного отражения ε полагается независимым от молекулярных скоростей.

2. Модель Эпштейна [5] получена эмпирически на основе анализа экспериментальных данных по коэффициентам аккомодации энергии различных газов на вольфраме и учитывает зависимость коэффициента диффузного отражения ε от скорости молекул. Содержит три независимых параметра: θ_1, θ_2 – параметры, имеющие размерность температуры и учитывающие вклад молекул газа с низкими и высокими энергиями соответственно. Безразмерный параметр ε_∞ представляет собой коэффициент диффузного отражения молекул, имеющих предельно большие скорости.
3. Модель Бормана и соавторов [6] учитывает зависимость коэффициента диффузного отражения ε от скорости молекул, определенную в результате теоретического анализа неравновесной системы «газ-твёрдое тело». Включает параметр B , равный отношению времени релаксации приповерхностного ансамбля молекул газа при взаимодействии их с фонами поверхности к среднему времени пролета молекулой поля поверхностных сил.
4. Модель Черчньяни – Лэмпис (CL-модель) [7] – математическая модель, содержащая два независимых параметра: α_τ – коэффициент аккомодации тангенциального импульса; α_n – коэффициент аккомодации той части кинетической энергии, которая соответствует движению молекул по нормали к поверхности.

С использованием метода характеристик кинетическое уравнение записано в интегральной форме для сферической частицы. Сформулирован итерационный метод решения этого уравнения для больших чисел Кнудсена.

Во второй главе изложены постановка задачи и результаты расчета силы сопротивления при движении макроскопической частицы в газе в условиях почти свободномолекулярного режима ($Kn \gg 1$) при произвольном ядре рассеяния при малых числах Маха и Броуна.

Получено выражение для силы сопротивления, приведенной к ее значению при полной аккомодации в свободномолекулярном режиме:

$$F_D^* = \frac{F_D}{F_D^{fm}} = \frac{8}{8 + \pi} \left(1 + R_{D1} + \delta R_{D2} \right); \quad (1)$$

$$F_D^{fm} = -\frac{2}{3}(8 + \pi)\sqrt{\pi}p_0r_0^2\frac{U_\infty}{\bar{v}}, \quad \bar{v} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}, \quad \delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2Kn}.$$

Здесь R_{D1}, R_{D2} – аккомодационные функции, представляющие собой интегралы по скоростям налетающих на частицу и отраженных от нее молекул

и содержащие ядро рассеяния; r_0 — радиус частицы; U_∞ — скорость набегающего потока газа; m — масса молекулы; k — постоянная Больцмана; T — температура.

Проведены аналитические и численные расчеты силы сопротивления и полей макроскопических величин вблизи частицы с использованием четырех представленных выше моделей ядра рассеяния.

С использованием модели Максвелла получено следующее выражение:

$$F_D^* = 0.718 + 0.282\varepsilon - \delta[0.710 - 0.210\varepsilon + 0.0312\varepsilon^2]. \quad (2)$$

Увеличение доли зеркально отраженных молекул приводит к уменьшению силы сопротивления, поскольку уменьшается напряжение трения на поверхности частицы.

Аналитические результаты с использованием модели Бормана были получены для двух случаев по параметру B :

—при почти диффузном рассеянии молекул ($B \ll 1$)

$$F_D^* = 1 - 0.159B - \delta(0.531 + 0.323B); \quad (3)$$

—при почти зеркальном отражении ($B \gg 1$)

$$F_D^* = 0.718 - 0.693\delta + \frac{1}{B} \left(0.636 + 0.141\delta \right). \quad (4)$$

Результат численного расчета силы сопротивления при промежуточных значениях параметра B представлен на рис. 1.

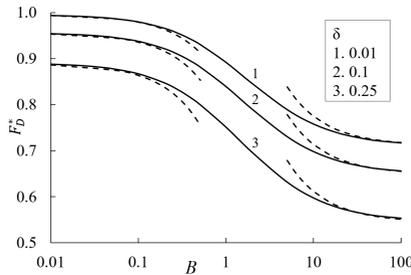


Рис. 1 — Приведенная сила сопротивления для модели Бормана; пунктирные линии соответствуют формулам (3) и (4).

Имеет место монотонное уменьшение силы сопротивления с увеличением доли зеркально отраженных молекул для всех рассмотренных значений параметра разреженности δ , аналогично максвелловской модели. Если время релаксации молекул газа при взаимодействии с фонами поверхности существенно превышает время пролета поля действия поверхностных сил, напряжения трения практически не возникают.

С использованием модели Эпштейна компактное аналитическое выражение получено для почти диффузного рассеяния молекул:

$$F_D^* = 1 - 0.531\delta - (1 - \varepsilon_\infty)(0.253 + 0.114\delta) - (0.0541 + 0.0323\delta)T_0 \left(\frac{1}{\theta_1} - \frac{1}{\theta_2} \right). \quad (5)$$

Результаты расчета при промежуточных значениях параметров модели представлены на рис. 2.

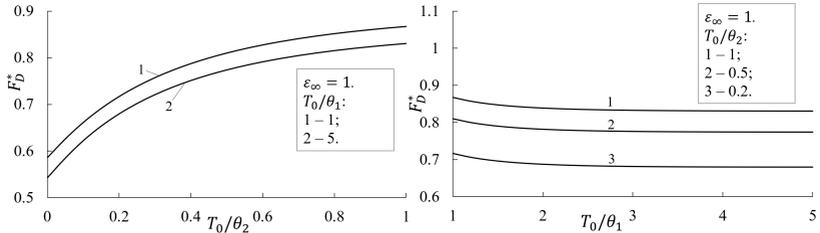


Рис. 2 — Зависимость силы сопротивления от параметров модели Эпштейна при $\delta = 0.25$.

В случае CL-модели аналитический результат удается получить при почти полной аккомодации молекул газа на поверхности частицы:

$$F_D^* = 1 - 0.359(1 - \alpha_\tau) + 0.0704(1 - \alpha_n) - \delta[0.531 + 0.177(1 - \alpha_n)]. \quad (6)$$

Для промежуточных значений параметров модели был проведен численный расчет. Результат представлен на рис. 3.

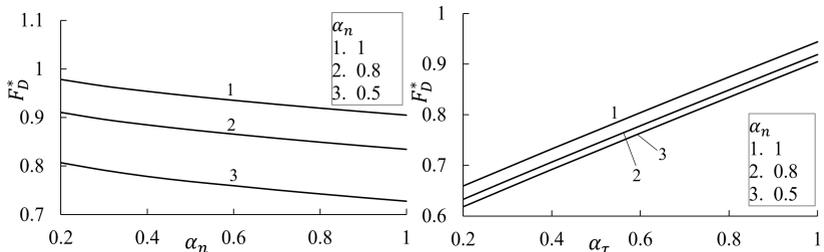


Рис. 3 — Приведенная сила сопротивления как функция аккомодационных параметров CL-модели при $\delta = 0.2$.

Неполная аккомодация тангенциального импульса приводит к уменьшению силы сопротивления вследствие уменьшения напряжений трения на поверхности частицы; неполная аккомодация энергии движения молекул по нормали к стенке увеличивает силу сопротивления. В результате работы

сил вязкости кинетическая энергия набегающего потока газа диссипируется вблизи фронтальной поверхности частицы и переходит в тепловую энергию, часть которой в зависимости от значения коэффициента аккомодации передается частице. Чем меньше коэффициент аккомодации энергии, тем выше температура газа и, следовательно, больше импульс налетающих на частицу молекул, а значит, больше нормальные напряжения и действующая на частицу сила, направленная против ее движения.

На рис. 4 представлено сравнение теории с экспериментальными данными Милликена [8] для капель часового масла в воздухе. В табл. 1 приведены значения параметров использованных моделей ядра рассеяния, полученные из требования наилучшего согласия теории с экспериментом.

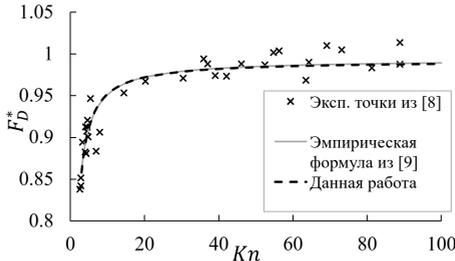


Рис. 4 — Сравнение теории с экспериментальными данными Милликена; сплошная линия — эмпирическая формула Милликена с коэффициентами Аллена-Раабе [9]; пунктирная линия соответствует теории с параметрами из табл. 1.

Таблица 1 — Аккомодационные параметры для различных моделей

Модель Максвелла	$\varepsilon = 0.98$
Модель Бормана	$B = 0.05$
Модель Эшштейна	$T_0/\theta_1 = 1, T_0/\theta_2 = 0.9, \varepsilon_\infty = 1$
Модель CL	$\alpha_n = 0.6, \alpha_\tau = 0.9$

Согласие результатов, полученных для четырех моделей ядра рассеяния, с экспериментом, позволяет утверждать, что выражение (1) может быть использовано для расчета силы сопротивления с использованием как известных моделей ядра рассеяния, так и тех, которые будут разработаны в будущем.

В третьей главе изложены постановка и решение задачи о термореже аэрозольной частицы в почти свободномолекулярном режиме.

В газе внешними источниками поддерживается постоянный градиент температуры $|\nabla T|_\infty$. Функция распределения налетающих молекул мало отличается от функции Чепмена — Энскога. Линеаризованное кинетическое уравнение включает только возмущения в газе, обусловленные наличием в нем частицы. Распределение температуры внутри и на поверхности частицы определяется из решения уравнения теплопроводности с граничным условием непрерывности радиального потока тепла.

Получены выражения для термофоретической силы и скорости движения частицы при произвольном ядре рассеяния, приведенных к их значения при полной аккомодации в свободномолекулярном режиме:

$$F_T^* = \frac{F_T}{F_T^{fm}} = 1 + R_{T1} + \delta R_{T2}; \quad F_T^{fm} = -\frac{16}{15} \sqrt{\pi} r_0^2 \frac{\lambda}{\bar{v}} |\nabla T|_\infty; \quad (7)$$

$$u_T^* = \frac{u_T}{u_T^{fm}} = \frac{8 + \pi}{8} \frac{1 + R_{T1} + \delta R_{T2}}{1 + R_{D1} + \delta R_{D2}}; \quad u_T^{fm} = -\frac{8}{5} \frac{\lambda |\nabla T|_\infty}{p_0 \bar{v} (8 + \pi)}.$$

Аккомодационные функции R_{T1} , R_{T2} представляют собой интегралы от ядра рассеяния по скоростям налетающих и отраженных молекул. Функция R_{T2} включает также параметр теплопроводности Λ , равный отношению коэффициента теплопроводности частицы λ_p к коэффициенту теплопроводности газа λ . R_{D1} , R_{D2} — аккомодационные функции, определяющие силу сопротивления в выражении (1).

С использованием модели Максвелла для силы и скорости термофореза получено:

$$F_T^* = 1 + \delta \left[0.094 - \varepsilon \left(0.442 - 0.124 \frac{1}{\Lambda} \right) + \varepsilon^2 \frac{1}{\Lambda} (0.023 + 0.050\Lambda) \right]. \quad (8)$$

$$u_T^* = \frac{3.55}{2.55 + \varepsilon} + \delta \left[\frac{9.78 - 6.30\varepsilon - 0.725\varepsilon^2 + 0.177\varepsilon^3}{(2.55 + \varepsilon)^2} + \frac{1}{\Lambda} \frac{1.13\varepsilon + 0.649\varepsilon^2 + 0.0810\varepsilon^3}{(2.55 + \varepsilon)^2} \right].$$

Влияние характера взаимодействия газа с поверхностью частицы на силу термофореза проявляется только в членах порядка δ . Увеличение доли зеркально отраженных молекул уменьшает касательные и в большей степени увеличивает нормальные напряжения на поверхности частицы. Как следствие, термофоретическая сила и скорость увеличиваются. Более подробно об этом при обсуждении результатов для СЛ-модели ниже.

Аналитические результаты для модели Бормана получены в случаях почти зеркального отражения ($B \gg 1$) и почти диффузного рассеяния молекул частицей ($B \ll 1$).

При $B \gg 1$ имеем

$$F_T^* = 1 + 0.0940\delta - \frac{1}{B} (0.282 + 0.693\delta); \quad (9)$$

$$u_T^* = 1.393 + 1.475\delta - \frac{1}{B} (1.63 + 4.12\delta).$$

В случае $B \ll 1$ получено

$$F_T^* = 1 - \delta \left[0.298 - 0.170B - \frac{1}{\Lambda}(0.147 - 0.436B) \right]; \quad (10)$$

$$u_T^* = 1 + 0.159B + \delta \left[0.233 + 0.614B - \frac{1}{\Lambda}(0.148 - 0.412B) \right].$$

Результаты численного расчета силы и скорости термофореза, приведенных к их свободномолекулярным значениям при полной аккомодации, как функции параметра B , представлены на рис. 5.

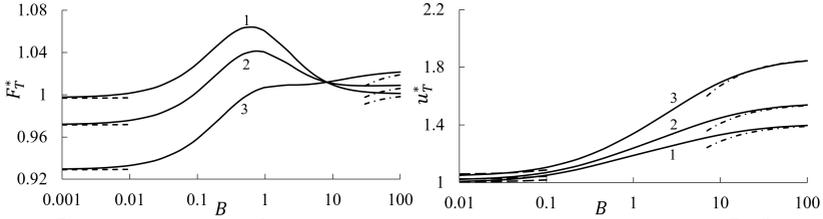


Рис. 5 — Зависимость термофоретической силы и скорости от параметра B ; δ : 1 — 0.01, 2 — 0.1, 3 — 0.25. Пунктирная линия — выражение (10), штрих-пунктирная линия — выражение (9).

Показана немонотонная зависимость термофоретической силы от параметра B . При промежуточных значениях параметра B сила имеет максимум, превышающей на 7% величину силы при полной аккомодации. Максимальное значение достигается в точке, где время релаксации приповерхностных молекул газа при взаимодействии с фонами поверхности частицы равно среднему времени пролета молекулой поля поверхностных сил.

Расчет с использованием модели Эшштейна представлен на рис. (6).

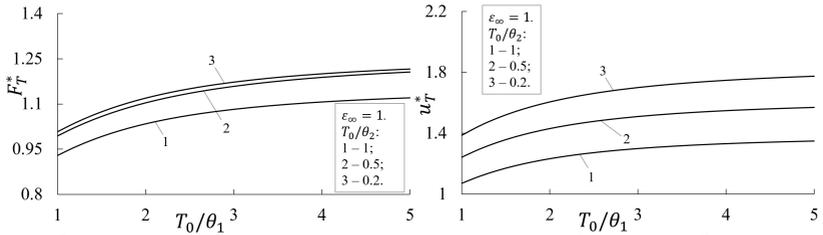


Рис. 6 — Зависимости приведенной силы и скорости термофореза при $\delta = 0.25$ от аккомодационных параметров модели Эшштейна.

Имеет место превышение термофоретической силы над ее значением в случае полной аккомодации при промежуточных значениях аккомодационных параметров модели. Величина максимального превышения достигается при $\delta = 0$ и составляет 28%.

С использованием CL-модели получены аналитические результаты при почти полной аккомодации молекул газа на поверхности частицы:

$$\begin{aligned}
 F_T^* &= 1 + 0.589(1 - \alpha_n) - 0.500(1 - \alpha_\tau) \\
 &- \delta \left\{ 0.298 + 0.417(1 - \alpha_n) - 0.0314(1 - \alpha_\tau) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{\Lambda} [0.148 - 0.236(1 - \alpha_n)] \right\}; \\
 u_T^* &= 1 + 0.518(1 - \alpha_n) - 0.141(1 - \alpha_\tau) \\
 &+ \delta \left\{ 0.144 + 0.0113(1 - \alpha_n) + 0.0283(1 - \alpha_\tau) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{\Lambda} [0.148 - 0.247(1 - \alpha_n) + 0.0530(1 - \alpha_\tau)] \right\}.
 \end{aligned} \tag{11}$$

Для промежуточных значений аккомодационных параметров был проведен численный расчет. Результаты представлены на рис. 7.

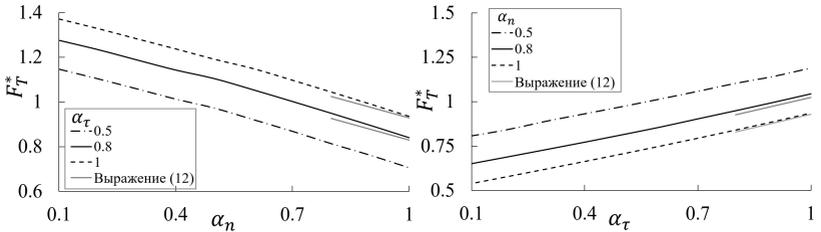


Рис. 7 — Приведенные значения силы термофореза как функции аккомодационных параметров при $\delta = 0.25$.

При уменьшении коэффициента аккомодации тангенциального импульса термофоретическая сила также уменьшается, так как уменьшается напряжение трения на поверхности частицы. При уменьшении коэффициента аккомодации энергии увеличивается температура газа и, следовательно, импульс отраженных молекул в той части поверхности частицы, где температура газа выше. Одновременно уменьшается импульс молекул, отраженных от той части поверхности, где температура газа ниже. Это означает, что увеличиваются нормальные напряжения и термофоретическая сила.

Исходя из требования наилучшего согласия теории с экспериментом были подобраны значения аккомодационных параметров использованных моделей ядра рассеяния. Они представлены в табл. 2.

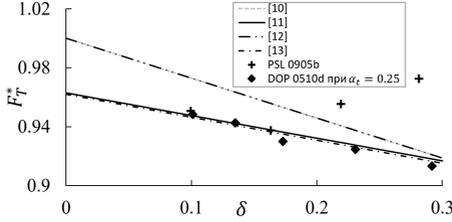


Рис. 8 — Сравнение приведенной термофоретической силы для различных моделей с экспериментальными данными работы [10].

Таблица 2 — Аккомодационные параметры моделей ядра рассеяния

Модель Максвелла	$\varepsilon = 1$
Модель Бормана	$B = 0$
Модель Эшштейна	$T_0/\theta_1 = 1.31, T_0/\theta_2 = 0.954, \varepsilon_\infty = 0.55$
Модель СЛ	$\alpha_n = 0.7, \alpha_\tau = 0.8$

Для всех использованных моделей ядра рассеяния, за исключением модели Максвелла, показана зависимость термофоретической силы от аккомодационных параметров в условиях свободномолекулярного режима. Установлено, что любое варьирование аккомодационных параметров моделей Максвелла и Бормана только увеличивает количественное расхождение теории с экспериментом. Таким образом, с использованием этих моделей не удастся описать экспериментальные данные по термофорезу.

В четвертой главе представлены постановка и решение задачи о силе, действующей на частицу в поле монохроматического оптического излучения (фотофорезе) в условиях свободномолекулярного режима.

Рассматривается одиночная частица, взвешенная в газе и облучаемая с одной стороны плоской волной монохроматического неполяризованного света с длиной волны λ_w и интенсивностью \mathbf{I} .

Газ вдали от частицы находится в состоянии равновесия и описывается максвелловской функцией распределения молекулярных скоростей.

Распределение температуры внутри однородной частицы $T_p(r, \theta)$ определяется из решения стационарного уравнения теплопроводности с учетом объемной плотности внутренних источников тепла [11]:

$$-\lambda_p \Delta T_p(r, \theta) = Q_V(r, \theta). \quad (12)$$

Согласно теории Ми [12], для произвольного дифракционного параметра $\rho = 2\pi r_0/\lambda$ имеем:

$$Q_v(r, \theta) = 4\pi n\kappa \frac{1}{\lambda_w} |\mathbf{I}| \frac{|\mathbf{E}(r, \theta)|^2}{|\mathbf{E}_0|^2},$$

где n – показатель преломления вещества частицы, κ – коэффициент поглощения, $\mathbf{E}(r, \theta)$ – локальная напряженность электрического поля внутри частицы, \mathbf{E}_0 – амплитуда напряженности электрического поля в падающей волне. Учтено, что задача обладает осевой симметрией относительно направления падения неполяризованного излучения.

Предполагалось, что температура поверхности частицы незначительно отличается от температуры газа. Ядро рассеяния, зависящее от температуры поверхности частицы, разлагалось в ряд Тейлора по малому параметру возмущения равновесной температуры и учитывался только линейный член разложения. В результате было определено граничное условие для функции распределения, содержащее производную от ядра рассеяния по температуре поверхности частицы.

В результате для неподвижной частицы в условиях свободномолекулярного режима было получено следующее выражение для фотофоретической силы:

$$F_p = -\frac{\pi}{3} \frac{r_0^2 p_0 I J_1 R_{p1}}{\lambda_p r_0 / T_0 + p_0 \bar{v} R_{p2} / 8}. \quad (13)$$

Аккомодационные функции R_{p1} , R_{p2} представляют собой интегралы по скоростям молекул и содержат произвольное ядро рассеяния; величина J_1 – так называемый фактор асимметрии распределения температуры поверхности частицы, определяющий величину и знак фотофоретической силы.

С использованием модели Максвелла получено:

$$F_p = -\frac{\pi}{3} \frac{r_0^2 p_0 \varepsilon I J_1}{\lambda_p T_0 / r_0 + p_0 \bar{v} \varepsilon / \sqrt{\pi}}. \quad (14)$$

Аналитический расчет для модели Бормана в случае почти зеркального отражения молекул ($B \gg 1$) показывает равенство нулю фотофоретической силы. При почти диффузном рассеянии ($B \ll 1$) имеем:

$$F_p = -\frac{1}{3} \frac{r_0^2 p_0 \sqrt{\pi} (\sqrt{\pi} - 4B) I J_1}{\lambda_p T_0 / r_0 + p_0 \bar{v} (1/\sqrt{\pi} - 15B/16)}. \quad (15)$$

Численные расчеты с использованием всех моделей ядра рассеяния проводились для величины, представляющей собой отношение фотофоретической силы к её значению при полной аккомодации. Для количественной оценки использовалась конкретная система, представляющая собой стеклянную частицу с радиусом $r_0 = 1.4$ мкм и теплопроводностью $\lambda_p = 0.92$ Вт/(м · К), которая находится в гелии. Температура газа $T_0 = 300$ К и давление $p_0 = 10$ Па.

Результат численного расчета фотофоретической силы, приведенной к её значению при полной аккомодации (формула (14) при $\varepsilon = 1$) с использованием модели Бормана, как функции параметра B показан на рис. 9.

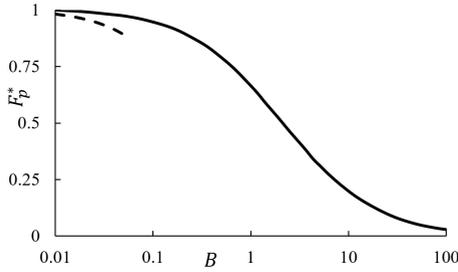


Рис. 9 — Приведенная сила фотофореза для модели Бормана как функция параметра B . Пунктирная линия соответствует выражению (15).

Для модели Эпштейна был проведен численный расчет. Фотофоретическая сила, приведенная к её значению при полной аккомодации, как функция параметров θ_1/θ_2 и ε_∞ представлена на рис. 10.

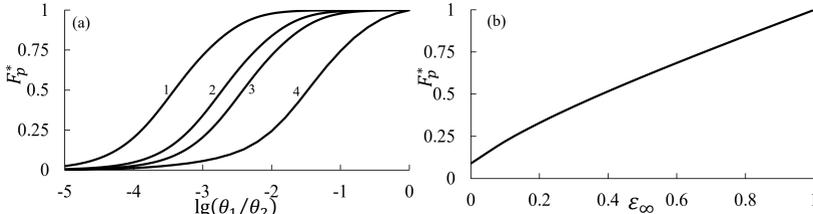


Рис. 10 — Приведенная сила фотофореза для модели Эпштейна как функция аккомодационных параметров: (a): θ_1/T_0 : 1 — 0.001; 2 — 0.005; 3 — 0.01; 4 — 0.1; (b): $\theta_1 = \theta_2 = T_0$.

Результат для модели СЛ был получен аналитически для любых значений аккомодационных параметров α_τ и α_n и имеет вид:

$$F_p = -\frac{1}{3} \frac{r_0^2 p_0 \alpha_n I J_1}{\lambda_p T_0 / r_0 + p_0 \bar{v} / (2\sqrt{\pi}) [\alpha_\tau (2 - \alpha_\tau) + \alpha_n]}. \quad (16)$$

Фотофоретическая сила прямо пропорциональна коэффициенту аккомодации энергии движения молекул по нормали α_n . Неоднородность температуры частицы с уменьшением аккомодации энергии в меньшей степени воспринимается газом. Следовательно, фотофоретическая сила уменьшается.

Показано, что в свободномолекулярном режиме величина фотофоретической силы определяется не непосредственно ядром рассеяния, а его температурной неоднородностью.

В пятой главе изложены постановка и решение задачи о диффузиофорезе аэрозольной частицы в бинарной газовой смеси в условиях свободномолекулярного режима.

Состояние газовой смеси возмущено постоянными градиентами относительных мольных концентраций $x_1 = n_1/n$, $x_2 = n_2/n = 1 - x_1$ (n_α

— числовая плотность молекул сорта α). Предполагалось, что функция распределения вдали от частицы соответствует первому приближению Чепмена — Энскага [13] и не искажается вблизи частицы за счет столкновений с отраженными молекулами.

В условиях свободномолекулярного режима были получены выражения для диффузионной силы F_d , и скорости диффузиофореза v_d относительно центра масс газовой смеси для произвольного ядра рассеяния:

$$F_d = \frac{8}{3} \sqrt{\pi} r_0^2 \frac{n^2}{\rho} m_1 m_2 D_{12} [\bar{v}_2 (1 + R_2) - \bar{v}_1 (1 + R_1)] |\nabla x_\infty|; \quad (17)$$

$$v_d = -\frac{n}{\rho} \sqrt{m_1 m_2} D_{12} |\nabla x_\infty| \frac{\sqrt{m_2}(1 + R_1) - \sqrt{m_1}(1 + R_2)}{x_1 \sqrt{m_1}(1 + R_1) + x_2 \sqrt{m_2}(1 + R_2)}. \quad (18)$$

Здесь R_α — аккомодационная функция, определяемая интегралом от ядра рассеяния молекул сорта α по скоростям налетающих на частицу и отраженных от нее молекул; m_α — масса молекул сорта α ; ρ — массовая плотность смеси; D_{12} — коэффициент взаимной диффузии. Важно отметить, что аккомодационная функция R_α не зависит от масс молекул и полностью определяется моделью ядра рассеяния. В случае полной аккомодации молекул газа на поверхности частицы имеем $R_\alpha = \pi/8$, а при отсутствии аккомодации $R_\alpha = 0$. Уменьшение аккомодационных функций обеих компонентов приводит к уменьшению величины диффузионной силы и скорости диффузиофореза. Максимальная величина уменьшения составляет около 40%, независимо от масс молекул.

Из выражения для диффузионной силы (17) видно, что при определенных значениях аккомодационных функций компонентов и масс молекул ее знак может изменяться на противоположный. Критерий инверсии таков:

$$\beta = \frac{1 + R_1}{1 + R_2} \sqrt{\frac{m_2}{m_1}}. \quad (19)$$

При $\beta = 1$ диффузионная сила отсутствует. Пусть первый компонент легче второго ($m_1 < m_2$). Тогда при $\beta < 1$ диффузионная сила будет направлена по градиенту концентрации легкого компонента и противоположно ему при $\beta > 1$. Если молекулы разных компонентов смеси взаимодействуют со стенкой одинаковым образом ($R_1 = R_2$), то диффузионная сила всегда будет направлена против градиента концентрации легкого компонента.

Инверсия знака силы определяется не только характером взаимодействия молекул с поверхностью, но и соотношением масс молекул компонентов. В связи с этим существует предельное соотношение молекулярных масс, при котором возможна инверсия:

$$\sqrt{\frac{m_2}{m_1}} = \frac{\pi + 8}{8} \approx 1.393.$$

В случае большего соотношения масс, инверсия знака силы невозможна.

Для скорости диффузиофореза установлено, что в случае произвольного, но одинакового взаимодействия молекул разных компонент газовой смеси, скорость движения частицы не зависит от характера взаимодействия газов с ее поверхностью и всегда будет направлена по градиенту концентрации легкого компонента.

Для иллюстрации явления инверсии представлен график зависимости силы и скорости диффузиофореза, приведенных к их значениям при полной аккомодации (формулы (17), (18) при $R_\alpha = \pi/8$) от аккомодационной функции легкого компонента R_1 в случае полной аккомодации тяжелого компонента ($R_2 = \pi/8$) (рис. 11). Взяты пары газов с близкими массами ($Ar - CO_2$) и с сильно различающимися массами ($He - Ar$).

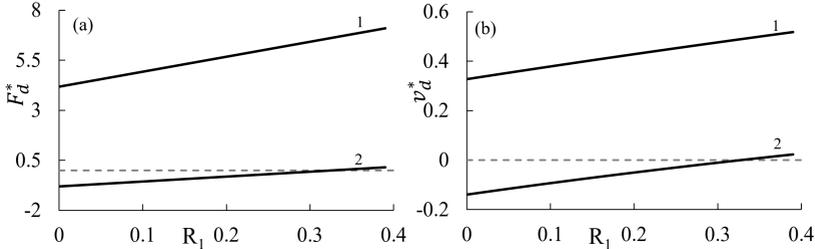


Рис. 11 — Зависимость диффузионной силы (а) и скорости (б) от аккомодационной функции R_1 при $R_2 = \pi/8$: 1 — $He - Ar$, 2 — $Ar - CO_2$.

Так, для смеси $He - Ar$ в случае полной аккомодации тяжелого компонента, уменьшение аккомодации легкого компонента приводит к уменьшению силы и скорости диффузиофореза. Для смеси $Ar - CO_2$, сила и скорость диффузиофореза меняют направление на противоположное градиенту концентрации легкого компонента — аргона при $R_1 = (1 + \pi/8)\sqrt{m_{Ar}/m_{CO_2}} - 1 = 0.327$.

С использованием модели Максвелла получен следующий результат для аккомодационной функции α — компонента:

$$R_\alpha = \frac{\pi}{8} \varepsilon_\alpha. \quad (20)$$

Результаты расчета аккомодационной функции R_α с использованием модели Эшштейна представлены на рис. 12.

Для модели Бормана при почти зеркальном отражении молекул ($B_\alpha \gg 1$) получено:

$$R_\alpha = \frac{\sqrt{\pi}}{2B_\alpha}; \quad (21)$$

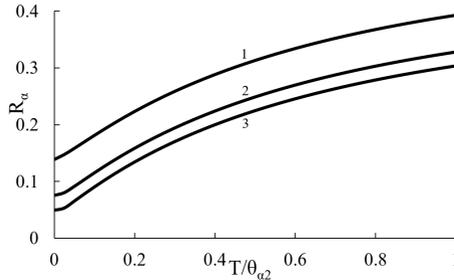


Рис. 12 — Зависимость аккомодационной функции R_α от параметров модели Эпштейна: 1 — $T/\theta_{\alpha 1} = 1$; 2 — $T/\theta_{\alpha 1} = 2$; 3 — $T/\theta_{\alpha 1} = 3$.

при почти диффузном рассеянии ($B_\alpha \ll 1$)

$$R_\alpha = \frac{\pi}{8} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} B_\alpha \right]. \quad (22)$$

При промежуточных значениях параметра B_α проведен численный расчет, представленный на рис. 13.

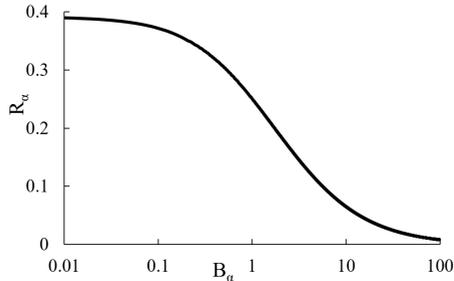


Рис. 13 — Зависимость аккомодационной функции R_α от параметра B_α модели Бормана.

Аналитический результат для модели CL был получен в приближении почти полной аккомодации молекул и имеет вид

$$R_i = -\frac{1}{32} [16(1 - \alpha_{i\tau}) - \pi(5 - \alpha_{in})]; \quad i = 1, 2. \quad (23)$$

При промежуточных и малых значениях аккомодационных параметров модели был проведен численный расчет функции R_i . Результаты представлены на рис. 14.

Показано, что уменьшение аккомодации тангенциального импульса приводит к монотонному увеличению R_i . Увеличение аккомодации энергии движения по нормали α_{in} монотонно уменьшает функцию R_i . Отметим, что при определенных значениях аккомодационных параметров функция

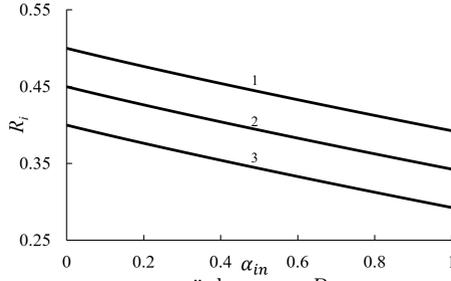


Рис. 14 — Зависимость аккомодационной функции R_i для модели CL от α_{in} при различных значениях $\alpha_{i\tau}$: 1 — $\alpha_{i\tau} = 1$; 2 — $\alpha_{i\tau} = 0.9$; 3 — $\alpha_{i\tau} = 0.8$

R_i может превышать её значение при полном диффузном рассеянии молекул. Максимальное превышение достигается при $\alpha_{in} = 0$ и $\alpha_{i\tau} = 1$ и составляет 27%.

В работе [14] измерялась скорость диффузиофореза частиц силиконового масла М300 при диффузии водяного пара через неподвижный азот при малых и промежуточных числах Кнудсена. Поскольку скорость диффузиофореза практически не зависит от Kn [15; 16], на рис. 15 представлено сравнение теории с экспериментальными данными работы [14] для приведенной скорости диффузиофореза, связанной со среднечисловой скоростью газовой смеси:

$$u_d = -D_{12}|\nabla x_\infty| \frac{\sqrt{m_1}(1+R_1) - \sqrt{m_2}(1+R_2)}{x_1\sqrt{m_1}(1+R_1) + x_2\sqrt{m_2}(1+R_2)}; \quad (24)$$

$$u_d^* = \frac{u_d}{u_{d0}}; \quad u_{d0} = -D_{12}|\nabla x_\infty| \frac{\sqrt{m_1} - \sqrt{m_2}}{x_1\sqrt{m_1} + x_2\sqrt{m_2}}.$$

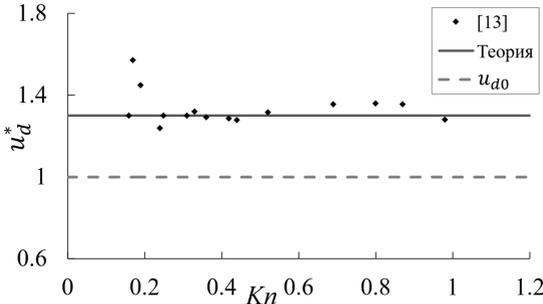


Рис. 15 — Сравнение теории с экспериментальными данными работы [14]; Пунктирная линия соответствует полной аккомодации.

Из требования наилучшего согласия теории с экспериментом [14] были подобраны значения аккомодационных параметров всех использованных моделей ядра рассеяния.

Таблица 3 — Аккомодационные параметры для различных моделей

Модель Максвелла	$\varepsilon_1 = 0.42; \varepsilon_2 = 0.77.$
Модель Эпштейна	$T/\theta_{11} = 1.30; T/\theta_{12} = 0.36; T/\theta_{21} = 1.17;$ $T/\theta_{22} = 0.85; \varepsilon_{\infty 1} = 0.74; \varepsilon_{\infty 2} = 1.0.$
Модель Бормана	$B_1 = 14.0; B_2 = 0.5.$
СL-модель	$\alpha_{1n} = 0.63; \alpha_{2n} = 0.89;$ $\alpha_{1\tau} = 0.29; \alpha_{2\tau} = 0.86.$

Расчеты силы и скорости диффузиофореза показали количественное согласие для всех использованных моделей ядра рассеяния.

Показано, что для газовых смесей с близкими молярными массами компонентов, характер взаимодействия газа с поверхностью влияет как на величину, так и на знак силы и скорости диффузиофореза. Установлено, что в случае произвольного, но одинакового взаимодействия молекул разных компонентов газовой смеси, скорость движения частицы не зависит от характера взаимодействия газов с ее поверхностью и всегда будет направлена по градиенту концентрации легкого компонента.

В заключении подведены итоги диссертационного исследования, изложены его основные выводы и обобщающие результаты.

Основные результаты и выводы

Разработаны физико-математические модели силы сопротивления, силы и скорости термофореза аэрозольной частицы в почти свободномолекулярном режиме, фотофоретической и диффузионной сил в свободномолекулярном режиме при произвольном ядре рассеяния. На основе аналитических и численных расчетов с использованием известных моделей ядра рассеяния получены зависимости сил и скоростей движения частицы от аккомодационных параметров этих моделей.

1. Используемые модели ядра рассеяния, за исключением максвелловской, показали зависимость термофоретической силы в свободномолекулярном режиме от аккомодационных свойств частицы и газа.
2. В свободномолекулярном режиме величина фотофоретической силы определяется температурной неоднородностью ядра рассеяния. С использованием СL-модели получено, что величина этой силы слабо зависит от коэффициента аккомодации тангенциального импульса.
3. В неоднородной по концентрации бинарной смеси газов с близкими молярными массами аккомодация молекул на поверхности частицы влияет как на величину, так и на направление силы и

скорости диффузиофореза. Получен количественный критерий инверсии знака диффузионной силы.

4. Для произвольного, но одинакового взаимодействия молекул разного сорта с поверхностью частицы, скорость диффузиофореза не зависит от характера этого взаимодействия в свободномолекулярном режиме.
5. Все использованные модели ядра рассеяния количественно описывают экспериментальные данные по силе сопротивления, а также скорости диффузиофореза. В случае термофореза это удалось сделать только для модели ядра рассеяния Эпштейна и CL-модели. Варьирование аккомодационных параметров моделей Максвелла и Бормана только увеличивает количественное расхождение теории с экспериментом.
6. Разработанная теория сил, действующих на аэрозольную частицу, и скоростей ее движения при сравнении с экспериментом позволяет оценить эффективность той или иной модели ядра рассеяния и является источником достоверной информации о значениях аккомодационных параметров этой модели.

Перспективы дальнейшей разработки темы

Подводя итог, отметим два основных направления развития представленного исследования. Первое связано с разработкой теории движения аэрозольной частицы в неоднородном газе для более широкого диапазона значений числа Кнудсена при произвольном ядре рассеяния. Второе направление связано с разработкой моделей движения аэрозольной частицы в ограниченном неоднородном газе с целью проведения более полного сравнения теории с имеющимися экспериментальными данными.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант №19-31-90019/19).

Цитируемая литература

1. Шахов, Е. М. О приближенных кинетических уравнениях в теории разреженных газов / Е. М. Шахов // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. — 1968. — Т. 1. — С. 156—161.
2. Коган, М. Н. Динамика разреженного газа: Кинетическая теория / М. Н. Коган. — М. : Наука, 1967. — 440 с.
3. Черчиньяни, К. Теория и приложения уравнения Больцмана / К. Черчиньяни. — М. : Мир, 1978. — 496 с.
4. Niven, W. D. The scientific papers of James Clerk Maxwell / W. D. Niven. — New York : Dover Pub., 1965. — 656 p.
5. Epstein, M. A model of the wall boundary conditions in kinetic theory / M. Epstein // AIAA J. — 1967. — Vol. 5, no. 10. — P. 1797—1800.

6. *Борман, В. Д.* К теории неравновесных явлений на границе раздела газ – твердое тело / В. Д. Борман, С. Ю. Крылов, А. В. Просянов // ЖЭТФ. — 1988. — Т. 94, № 10. — С. 271—289.
7. *Cercignani, C.* Kinetic models for gas-surface interactions / C. Cercignani, M. Lampis // Transp. Theor. Stat. Phys. — 1971. — Vol. 1, no. 2. — P. 101—114.
8. *Millikan, R. A.* The general law of fall of a small spherical body through a gas, and its bearing upon the nature of molecular reflection from surfaces / R. A. Millikan // Phys. Rev. — 1923. — Vol. 22, no. 1. — P. 1—23.
9. *Allen, M. D.* Re-evaluation of Millikan's oil drop data for the motion of small particles in air. / M. D. Allen, O. G. Raabe // J. Aerosol Sci. — 1982. — Vol. 13, no. 6. — P. 537—547.
10. *Li, W.* Measurement of the Thermophoretic Force by Electrodynamic Levitation: Microspheres in Air. / W. Li, E. J. Davis // J. Aerosol Sci. — 1995. — Vol. 26. — P. 1063—1083.
11. *Яламов, Ю. И.* Теория движения мелкой аэрозольной частицы в поле оптического излучения / Ю. И. Яламов, В. Б. Кутуков, Е. Р. Щукин // ИФЖ. — 1976. — Т. 30, № 6. — С. 996—1002.
12. *Bohren, C. F.* Absorption and Scattering of Light by Small Particles / C. F. Bohren, D. R. Huffman. — NY : Wiley, 1983. — 544 p.
13. *Черняк, В. Г.* Кинетика разреженного газа: Учебное пособие / В. Г. Черняк. — СПб : Изд-во «Лань», 2018. — 540 с.
14. *Schmitt, K. H.* Untersuchungen an Schwebstoffteilchen in diffundierendem Wasserdampf. / K. H. Schmitt // Z. Naturforsch. — 1961. — Vol. 16a. — P. 144—149.
15. *Мейсон, Э.* Перенос в пористых средах: модель запыленного гаа / Э. Мейсон, А. Малинаускас. — М : Мир, 1986. — 200 с.
16. *Черняк, В. Г.* Диффузиофорез аэрозольной частицы в бинарной газовой смеси. / В. Г. Черняк, С. А. Стариков, С. А. Береснев // ПМТФ. — 2001. — Т. 42, № 3. — С. 72—83.

Список основных работ по теме диссертации

Научные статьи, опубликованные автором по теме диссертации

1. Chernyak V. G. The role of molecule-surface interaction in thermophoresis of an aerosol particle / V. G. Chernyak, **T. V. Sogradi** // Journal of Aerosol Science - 2019, Vol. 128, P. 62-71. 0.57 п.л./ 0.28 п.л. — (Scopus, Web of science).

2. Chernyak V. G. The role of molecule-surface interaction in the photophoresis of an aerosol particle / V. G. Chernyak, **T. V. Sograbi** // Journal of Aerosol Science - 2019, Vol. 134, P. 65-71. 0,48 п.л./ 0,20 п.л. – (Scopus, Web of science).
3. Chernyak V. G. The role of molecule-surface interaction in the diffusiophoresis of an aerosol particle / V. G. Chernyak, **T. V. Sograbi** // Journal of Aerosol Science - 2020, Vol. 144, 105532. 0,64 п.л./ 0,30 п.л. – (Scopus, Web of science).
4. Chernyak V. G. The dependence of the drag force of a moving aerosol particle on its nature of molecule-surface interaction / V. G. Chernyak, **T. V. Sograbi** // Journal of Aerosol Science - 2022, Vol. 164, 106007. 0,95 п.л./ 0,45 п.л. – (Scopus, Web of science).

Тезисы международных и всероссийских конференций

5. The dependence of thermophoresis on molecule-surface interaction / V.G. Chernyak, **T. V. Sograbi** // Abstracts of European Aerosol Conference (EAC-2019), Gothenburg, Sweden, August 25-30, 2019, – Web. – 0,1 п.л. / 0,05 п.л.
6. Роль взаимодействия газа с поверхностью в термофорезе аэрозольных частиц / В. Г. Черняк, **Т. В. Сограби** // Тезисы XXVI конференции «Аэрозоли Сибири», Томск, Россия, 25-29 ноября, 2019, – С.14. – 0,1 п.л. / 0,05 п.л.
7. Аккомодационная зависимость фотофореза аэрозольной частицы / В. Г. Черняк, **Т. В. Сограби** // Тезисы XXVI Международного Симпозиума «Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы», Москва, Россия, 06-10 июля 2020, – С.45 – 0,1 п.л. / 0,05 п.л.
8. Аккомодационная зависимость диффузиофореза в условиях свободномолекулярного режима / В. Г. Черняк, **Т. В. Сограби** // Тезисы XXVII конференции «Аэрозоли Сибири», Томск, Россия, 24-27 ноября, 2020, – С.4. – 0,1 п.л. / 0,05 п.л.
9. On the Role of Boundary Conditions in the Theory of Motion of Small Particles in a Rarefied Gas / V.G. Chernyak, **T. V. Sograbi** // Abstracts of Online Workshop on Recent Hot Topics in Rarefied Gas Dynamics (RGD32-Pre), Online, July 7-10, 2021, – P.118. – 0,1 п.л. / 0,05 п.л.

Подписано в печать _____._____._____ Заказ № _____

Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

Типография _____