

В.Н. Пискунов

ДИНАМИКА АЭРОЗОЛЕЙ



**МОСКВА
ФИЗМАТЛИТ®
2010**

УДК 533.7
ББК 22.365
П 34

Пискунов В.Н. **Динамика аэрозолей.** — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. — 296 с. — ISBN 978-5-9221-1286-4.

Монография посвящена теоретическим методам моделирования динамических процессов в аэродисперсных системах. Рассмотрены общие свойства дисперсных систем, сформулированы кинетические уравнения для процессов конденсации и коагуляции аэрозолей, исследованы общие свойства их решений. Изложен интегральный подход, позволяющий эффективно моделировать кинетику конденсации/коагуляции, разработаны подходы к моделированию кинетических процессов в многокомпонентных системах.

Рассмотрены теоретические и численные модели, предназначенные для описания динамических процессов в аэродисперсных системах. Разработана модель кинетики конденсации и коагуляции в системах с двухфазной дисперсной средой. Приведены результаты численного моделирования, полученные для кинетики формирования осадков в двух полномасштабных облачных экспериментах. Рассмотрены модели, используемые для описания источников промышленных и аварийных выбросов, приведены некоторые результаты моделирования. Описаны подходы, разработанные для расчета процессов атмосферного переноса, изложены материалы по моделированию экспериментов.

Приведены общие характеристики прикладных программ AERFORM и ПРОГНОЗ, разработанных в ядерном центре ВНИИЭФ для численного моделирования процессов формирования и переноса аэрозолей. Содержание и результаты адресованы специалистам, занимающимся созданием теоретических моделей и прикладных численных программ, а также практическими проблемами физики атмосферных аэрозолей.

Для специалистов, работающих в области физики атмосферы, механики двухфазных сред, математической физики, безопасности и охраны окружающей среды.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	6
Глава 1. Основные сведения о дисперсных системах	11
1.1. Атмосферные аэрозоли	12
1.2. Основные характеристики частиц дисперсной фазы	15
1.3. Движение частиц в среде-носителе	19
1.4. Броуновская диффузия аэрозолей	23
1.5. Процессы конденсации и испарения капель	27
1.6. Коагуляция аэрозолей	33
1.7. Диффузия и перенос аэрозолей в атмосфере	37
Глава 2. Кинетика зарождения и роста частиц дисперсной фазы	44
2.1. Формулировка кинетического уравнения для процесса конденсации	45
2.2. Скорости зародышеобразования и конденсационного роста	48
2.3. Поведение термодинамических величин с учетом процесса конденсации	52
2.4. Решения кинетического уравнения конденсации. Анализ упрощенной модели	56
2.5. Оценки для начальной стадии процессов нуклеации и конденсации в облаке	62
2.6. Асимптотическая стадия процесса конденсации	66
2.7. О численном моделировании асимптотической стадии процесса конденсации	70
Глава 3. Кинетика процессов коагуляции	73
3.1. Формулировка кинетического уравнения коагуляции	74
3.2. Коэффициенты коагуляции	78
3.3. Способы аналитического решения уравнения Смолуховского	80
3.4. Автономные асимптотические решения	84
3.5. Критические явления в процессе коагуляции	89
3.6. Коагуляция в присутствии внешних источников частиц	94
3.7. Совместное действие процессов коагуляции и дробления	98
3.8. Модели коагуляции с выпадением частиц в осадок	102
3.9. Коагуляция частиц в разреженной среде	106
Глава 4. Моделирование процессов формирования частиц на основе интегрального подхода	110
4.1. Формулировка подхода	111

4.2. Проверка асимптотического поведения интегральных величин для наиболее важных ядер коагуляции	114
4.3. Сравнение с сеточными методами	118
4.4. Сравнение с другими интегральными методами	129
4.5. Применение интегрального подхода для совместного моделирования кинетики коагуляции и конденсации	131
4.6. Заключительные замечания к главе	137
Глава 5. Формирование частиц в многокомпонентных системах . .	139
5.1. Коагуляция композитных частиц	140
5.2. Уравнения кинетики формирования частиц с учетом фазовых переходов	144
5.3. Аналитические решения кинетических уравнений	147
5.4. Применение GA-метода для многокомпонентных систем	153
Глава 6. Численные модели аэрозольной кинетики	157
6.1. Скорости коагуляции атмосферных аэрозолей	158
6.2. Скорости конденсации многокомпонентных частиц	161
6.3. Моделирование кинетики формирования аэрозолей с помощью программы AERFORM	165
6.4. Модель кинетики фазовых переходов в облачных системах	171
Глава 7. Моделирование процессов формирования осадков в облаках	185
7.1. Выбор облачных экспериментов для моделирования	186
7.2. Сыктывкарский эксперимент, результаты моделирования	189
7.3. Эксперимент Монтана, результаты расчетов	196
Глава 8. Параметризация процессов осаждения аэрозолей	205
8.1. Обзор данных	205
8.2. Аналитические формулы для скоростей осаждения на гладкие поверхности	207
8.3. Полуэмпирическая модель Земела для осаждения на шероховатые поверхности	216
8.4. Сводка результатов	225
Глава 9. Динамика формирования источников выброса	228
9.1. Модель формирования струйного выброса	229
9.2. Модель подъема облака взрыва	232
9.3. Общая картина аварийного взрыва	235
9.4. Результаты численного моделирования некоторых аварийных процессов	239
9.5. Численное моделирование динамики формирования аэрозольных частиц при больших пожарах	246

Глава 10. Атмосферный перенос примесей	255
10.1. Моделирование процессов переноса и осаждения аэрозольных частиц методом Монте-Карло	256
10.2. Характеристики программы ПРОГНОЗ	260
10.3. Сочетание экспериментального и теоретического подходов в проблеме прогнозирования	265
10.4. Диффузионные эксперименты ВНИИЭФ	268
10.5. Некоторые результаты моделирования	272
Список литературы	280

Введение

Сквозь волшебный прибор Левенгука
На поверхности капли воды
Обнаружила наша наука
Удивительной жизни следы.
Государство смертей и рождений,
Нескончаемой цепи звено,
В этом мире чудесных творений
Сколь ничтожно и мелко оно!
Но для бездн, где летят метеоры,
Ни большого, ни малого нет,
И равно беспредельны просторы
Для микробов, людей и планет.

Н. Заболоцкий. Сквозь волшебный
прибор Левенгука

В связи с большой распространенностью, широким практическим применением и своеобразием свойств, все большее внимание исследователей в различных областях физики атмосферы, науки об окружающей среде, техники и фундаментальной науки привлекают в последнее время дисперсные системы, т.е. системы, представляющие собой механическую смесь частиц дисперсной фазы со средой-носителем. Образование облаков и выпадение осадков (Мейсон, 1961; Мазин, Шмелер, 1983), формирование аэрозольной компоненты земной атмосферы (Юнге, 1965), эволюция допланетного роя и частиц межзвездной пыли (Сафронов, 1969; Кейдл, 1969; Silk and White, 1978), миграция дефектов в твердых телах (Гегузин, Кривоглаз, 1971; Слезов, Сагалович, 1987), двухфазные течения в лабораторных и промышленных установках (Левич, 1959; Райст, 1987), перенос в атмосфере различного рода промышленных и радиоактивных загрязнений (Юнге, 1965; Стыро, 1968; Грин, Лейн, 1972; Кароль, 1972; Пененко, Алоян, 1985; Алоян, 2008) — вот далеко не полный круг явлений, в которых решающую роль играют процессы, происходящие с дисперсными системами.

Обычно дисперсные системы подразделяют, исходя из агрегатного состояния частиц дисперсной фазы и среды-носителя. Ряд дисперсных систем получил отдельные названия: аэрозоли — взвесь твердых или жидких частиц в газовой среде, обычно в воздухе (Грин, Лейн, 1972; Райст, 1987; Пискунов, 2000); эмульсии — жидкие частицы, обычно стабилизированные защитными оболочками, в жидкой сре-

де, и коллоиды — взвесь твердых частиц в жидкой среде (Фролов, 1989); аэрозоли — твердые или жидкие частицы в вакууме (Silk and White, 1978; Лушников, Токарь, 1978; Петрянов-Соколов, Сутугин, 1989). Кроме того, существуют дисперсные системы без устоявшихся названий: ансамбли газовых пузырьков в твердом теле или жидкости, ансамбли жидких капель в твердом теле и так далее.

Дисперсные системы обладают многими необычными физическими свойствами, которые требуют отдельного изучения и сказываются на практике. Можно назвать своеобразную газодинамику, обусловленную различным движением среды-носителя и частиц дисперсной фазы; необычные оптические свойства, вызванные сравнимостью размеров частиц с длинами волн света и влиянием формы частиц; повышенную способность к взаимодействиям, вызванную чрезвычайно развитой поверхностью частиц. Особое место среди дисперсных систем занимают аэрозоли, о которых в основном и будет идти речь в дальнейшем.

Аэрозольные загрязнения наиболее динамичны и представляют собой непосредственную угрозу здоровью населения и окружающей среде. В связи с этим, задачи по оценке последствий и защите от техногенных катастроф и аварий, пожаров и стихийных бедствий всегда стоят очень остро. Для предприятий атомной отрасли актуальны проблемы постоянного мониторинга и контроля за потенциально опасными объектами, а также вопросы анализа последствий гипотетических аварий. По своей сути все перечисленные задачи являются интернациональными и в них заинтересовано все международное сообщество, поскольку интернациональна сама проблема аэрозольного трансграничного переноса. Осознание важности экологических проблем, связанных с влиянием жизнедеятельности человека на атмосферу и гидросферу Земли, является одним из наиболее серьезных стимулов к изучению процессов, управляющих поведением дисперсных систем в целом и аэрозолей в частности.

Экология и безопасность далеко не исчерпывают области, где имеет дело с дисперсными системами. Можно назвать массу природных объектов и множество технологических процессов, которые связаны с положительным присутствием и применением аэрозолей: атмосферные осадки; двухфазные течения, используемые в технологических процессах и установках; дисперсные среды для нужд пищевой промышленности, медицины и сельского хозяйства. Разнообразие физических проблем и технических приложений, а также целая совокупность необычных физических и химических свойств фактически позволяют отнести дисперсные системы к отдельному агрегатному состоянию вещества, которому заслуженное внимание стало уделяться лишь в последнее время.

Очень важной причиной повышающегося интереса к дисперсным системам среди физиков-профессионалов является разнообразие и фундаментальный характер задач, которые возникают в этой области. Физическая кинетика, оптика, физика атмосферы, многофазная газоди-

намика, теория турбулентности — все эти разделы механики и физики необходимо применять при создании теоретических моделей, описывающих поведение аэрозольных систем.

Значительный прогресс в моделировании процессов формирования и динамики переноса аэрозольных примесей достигнут в последнее время, благодаря разработке сложных многофакторных теоретических моделей и их реализации на быстродействующих ЭВМ. По сути дела, физика аэрозолей становится разделом строгой науки, используя аппарат теоретической и математической физики, что, в свою очередь, требует более высокого уровня знаний, необходимых для работы в этой области. С другой стороны, реализация на ЭВМ теоретических и численных моделей, включающих в себя все многообразие кинетических процессов в аэродисперсных системах и позволяющих одновременно описывать сложную динамику течений, дает возможность производить моделирование на уровне сложного численного эксперимента. Это усиливает прикладной аспект разработок и переводит их в инженерную плоскость, причем потребность в результатах моделирования ряда процессов, важных для охраны окружающей среды и безопасности постоянно растет.

Книга посвящена теоретическому моделированию динамических (в первую очередь кинетических) процессов в аэродисперсных системах. Материал книги условно можно разбить на три части. В гл. 1 изложены основные сведения, которые помогут ориентироваться в разнообразных методических и практических проблемах физики дисперсных систем, а также позволят оценить количественные характеристики протекающих процессов. В главах 2–5 дается теоретическая база и приводятся модели, позволяющие эффективно описывать процессы формирования частиц в дисперсных системах. И, наконец, в главах 6–10 изложены прикладные модели и результаты численного моделирования для ряда важных практических задач: формирования осадков в облачных системах, динамики формирования аварийных выбросов и дальнейшего переноса примесей в атмосфере. Книга практически не затрагивает проблемы разработки численных алгоритмов и программ, которые создавались коллегами автора и хорошо освещены в недавно вышедшей монографии (Алоян, 2008).

В гл. 1 содержится вводный материал и данные по механике и кинетике аэрозолей. Приведена классификация атмосферных аэрозолей, изложены основные количественные характеристики частиц, которые используются при описании дисперсных систем. Рассмотрена кинематика движения частиц в среде-носителе, седиментация, процессы броуновской диффузии, эффекты осаждения частиц при течении в каналах. Изложены основные закономерности процессов формирования частиц дисперсной фазы: нуклеации, конденсационного роста и испарения частиц, коагуляции. Описана формулировка кинетических уравнений конденсации и коагуляции. В конце главы рассмотрены диффузия

и перенос аэрозолей в атмосферных условиях, сделаны некоторые оценки для развития облака взрыва и переноса примесей в атмосфере.

В главах 2–5 приведены теоретические и численные модели, разработанные с участием автора для описания кинетических процессов в аэродисперсных системах. Глава 2 содержит детальный материал по кинетике конденсационного формирования аэрозолей, а гл. 3 — аналогичные данные по коагуляции. В гл. 4 описан интегральный подход, позволяющий эффективно моделировать кинетику конденсации/коагуляции в численных программах, в гл. 5 рассмотрены способы описания и моделирования кинетических процессов в многокомпонентных системах. В целом этот материал содержит устоявшуюся теоретическую базу, созданную при активном участии автора, которая необходима при разработке численных моделей и методов, а также для анализа и решения конкретных проблем физики атмосферы и безопасности, связанных с аэрозолями.

Главы 6–10 содержат прикладной материал. В гл. 6 конкретизированы данные по скоростям процессов коагуляции и конденсации в атмосферных условиях, приведены основные характеристики программы AERFORM, разработанной во ВНИИЭФ и предназначенной для численного моделирования кинетики формирования аэрозолей, описана модель фазового перехода в системах с двухфазной дисперсной средой, которая разработана для моделирования кинетики формирования осадков в смешанных облаках. В гл. 7 описана постановка расчетов и приведены результаты моделирования для двух крупных облачных экспериментов: в районе Сыктывкара (с зондированием группы капельных облаков) и в штате Монтана (исследовалось мощное смешанное облако). Глава 8 содержит материал по скоростям осаждения аэрозолей на граничные поверхности (местность, вертикальные стены) в широком диапазоне размеров и внешних условий. В гл. 9 изложены модели, используемые для описания источников промышленных и аварийных выбросов, и приведены некоторые результаты моделирования. В гл. 10 описана прикладная программа «ПРОГНОЗ», разработанная во ВНИИЭФ для расчета процессов переноса, приведены некоторые материалы по моделированию экспериментов. Главы 6–10 в основном адресованы специалистам, занимающимся созданием конкретных численных моделей, прикладными аспектами физики атмосферных аэрозолей, а также проблемами безопасности в атомной отрасли.

Первоначальный интерес к аэрозольной тематике и понимание ее важности возникли у автора в результате общения и совместной работы с сотрудниками отдела аэрозолей НИФХИ им. Л. Я. Карпова А. А. Лушниковым и А. Г. Сутугиным. Алексей Алексеевич Лушников был моим учителем и постоянным соавтором в течение многих лет. Особенно плодотворными явились контакты и многолетняя совместная работа по международным проектам с сотрудником ИВМ РАН А. Е. Алояном. Разработка математических алгоритмов и программ, а также решение многих прикладных задач осуществлялись совместно

с моими коллегами, в первую очередь с А. И. Голубевым (ВНИИЭФ) и М. А. Затевахиным (СПбАЭП). Разнообразные задачи, возникавшие в процессе работы, решались совместно с сотрудниками ВНИИЭФ А. М. Петровым, А. И. Харченко, Н. В. Ивановым, В. М. Повышевым, Н. А. Исмаиловой, Е. А. Гончаровым. Автор искренне признателен за помощь всем своим коллегам, которых он перечислил, а также академикам Ю. А. Трутневу, Г. И. Марчуку и И. В. Петрянову-Соколову за постоянное внимание к этой тематике и поддержку сотрудничества по проблемам моделирования в области охраны окружающей среды и безопасности между ВНИИЭФ, ИВМ РАН и НИФХИ им. Л. Я. Карпова.

Глава 1

ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМАХ

Как глаз на расползающийся мир
Свободно налагает перспективу
Воздушных далей,
Облачных кулис,
И к горизонту сводит параллели,
Внося в картину логику и строй, —
Так разум среди хаоса явлений
Распределяет их по ступеням
Причинной связи, времени, пространства
И укрепляет сводами числа.

М. Волошин. Путиами Каина. Космос

В данной главе изложены основные сведения, которые помогут ориентироваться в разнообразных практических проблемах физики дисперсных систем и позволят оценить количественные характеристики протекающих процессов. В разд. 1.1 приведена классификация атмосферных аэрозолей, описаны процессы, в которых они возникают или играют важную роль. В разд. 1.2 изложены основные количественные характеристики частиц, которые получают в результате измерений, а также используют при описании дисперсных систем. В разд. 1.3 рассмотрена кинематика движения частиц в среде-носителе, седиментация и процессы дробления под действием скоростного напора. Раздел 1.4 посвящен процессам броуновской диффузии частиц и эффектам осаждения при ламинарном течении дисперсных сред в каналах. В разд. 1.5 изложены основные закономерности процессов конденсационного роста и испарения частиц, а в разд. 1.6 оценено влияние процессов коагуляции на формирующиеся спектры частиц. Изложение сопровождается численными оценками, помогающими определить порядки основных величин и вклады рассматриваемых процессов. Для лучшего усвоения материал проиллюстрирован задачами (разд. 1.7), помогающими приобрести практические навыки.

1.1. Атмосферные аэрозоли

Обычно классификация атмосферных аэрозолей проводится (Грин, Лейн, 1972; Райст, 1987) на основе их разделения по способам создания, материалам и характерным размерам частиц. При этом к аэрозолям обычно относят частицы со скоростями осаждения не больше, чем у капелек воды диаметром 100 мкм (крупные дождевые капли и осадки тем самым относят к отдельному классу). Такая классификация в значительной мере условна и неоднозначна, но тем не менее помогает привести в систему наши обыденные понятия и термины.

Пыли состоят из твердых частиц, диспергированных в результате механического измельчения твердых тел (взрывы, горные работы и т. д.) или высыхания капелек с растворенными веществами или частицами (солевые частицы над океаном). В обыденном понятии пылью называют осадок твердых частиц на различных поверхностях, который легко переходит во взвешенное состояние. Материалы пыли самые различные, а размеры также колеблются в широких пределах — от субмикронных ($\sim 0,01$ мкм) до микроскопических (~ 100 мкм).

Дымы образуются при горении или возгонке летучих веществ, а также в результате химических и фотохимических реакций. Размеры дымовых частиц — от субмикронных до 5 мкм.

Туманы состоят из капелек жидкости, образующихся при конденсации пара или распылении жидкости. Сюда также включаются капли с растворенными веществами или содержащимися в них частицами. Природные туманы обычно состоят из капелек с диаметром до 10 мкм и более.

Капельки, а также частицы различных атмосферных загрязнений и пыли иногда называют *дымкой*, которая, на самом деле, представляет собой комбинацию из трех названных выше основных классов аэрозолей. Систему, образующуюся в результате взаимодействия природного тумана с газообразными загрязнениями, называют *смогом*. Размеры частиц дымки и смога обычно ~ 1 мкм.

Для иллюстрации в табл. 1.1 приведены характерные размеры различных типов аэрозолей, имеющих в быту и присутствующих в земной атмосфере (Райст, 1987).

Промышленные аэрозоли, образующиеся при получении и обработке горючих материалов, способны за счет развитой поверхности к более интенсивному воспламенению, чем исходные вещества. При скоплении мелкодисперсной пыли таких материалов в замкнутых помещениях и наличии источников воспламенения может произойти взрыв. В табл. 1.2 приведены пороговые концентрации для ряда промышленных пылей (Грин, Лейн, 1972).

В целом использование технологических процессов и работа производств, связанных с выходом аэрозолей в рабочие помещения или атмосферу, требует тщательной оценки экологической опасности и применения различных средств очистки. Особая чистота внутри помещений

Таблица 1.1. Типичные размеры аэрозольных частиц различного происхождения

Аэрозоль	Диаметр частиц, мкм
Табачный дым	0,25
Хлорид аммония	0,1
Туман серной кислоты	0,3–5,0
Цветочная пыльца	15–20
Атмосферный туман	2–50
Спрей из аэрозольного баллончика	1–100
Тальк	10
Фотохимические аэрозоли	0,01–1,00

требуется при работе с радиоактивными материалами и в микроэлектронике. Допустимое содержание аэрозолей регламентируется при этом соответствующими нормативными документами. Ряд средств очистки и принципы их работы описаны в изданиях (Спурный и др., 1964; Грин, Лейн, 1972; Петрянов-Соколов, Сутугин, 1989).

Частицы атмосферных аэрозолей играют важную роль в процессах конденсации водяного пара и тем самым в формировании осадков. В метеорологии их просто называют ядрами конденсации, независимо от физических и химических свойств, а классификацию проводят по характерным размерам (Юнге, 1965): частицы Айткена — $r < 0,1$ мкм; большие частицы — $r = 0,1$ –1 мкм; гигантские частицы — $r > 1$ мкм.

Источники атмосферных аэрозолей принято делить на естественные и антропогенные. К естественным относятся: вулканические извержения, конденсация водяного пара в атмосфере, выветривание пород, разбрызгивание капелек воды над океаном, космическая пыль. Для иллюстрации приведем некоторые цифры (Хргиан, 1986). За счет космической пыли на Землю поступает в год $(1,4\text{--}2,0) \cdot 10^7$ т вещества при общей массе атмосферы $\sim 5 \cdot 10^{15}$ т. В результате наиболее мощных извержений вулканов в атмосферу Земли выбрасывалось (Рампино, Селф, 1984; Хргиан, 1986):

- в. Тамбора, Индонезия, 1815 г., 175 км³ пепла,
- в. Кракатау, Зондский пролив, 1883 г., 20 км³ пепла,
- в. Санта-Мария, Гватемала, 1902 г., 10 км³ твердого вещества,
- в. Эль-Чичон, Мексика, 1982 г., 0,5 км³ пепла.

Таблица 1.2. Минимальные концентрации, при которых происходит воспламенение горючих пылей

Пыль	Концентрация, г/л
Мука	0,052
Сахар	0,066
Сухое молоко	0,1
Целлулоид	0,03
Каменный уголь	0,14–0,74

Примечательно, что облако поднимается при этом на огромную высоту (Кракатау — до 60 км, Эль-Чичон — до 37 км) и оседает только через очень продолжительное время. Например, облако вулкана Кракатау осело только через три года, а облако Эль-Чичона наблюдалось в Италии и Японии через полгода и вызвало понижение температуры в северном полушарии на $\sim 0,5^\circ\text{C}$ в течение трех лет (Рампино, Селф, 1984).

При пылевых бурях концентрация пыли в пустынных районах может достигать 300 мкг/м^3 , в Подмосковье — до 30 мкг/м^3 , в районах Урала — свыше 5 мкг/м^3 (Хргиан, 1986). За счет разбрызгивания капелек воды при ветре со скоростью $\sim 12 \text{ м/с}$ над океаном образуется до 500 мкг/м^3 солевых частиц. Это вполне ощутимые количества.

Антропогенными называются источники, обусловленные жизнедеятельностью человека: промышленные выбросы из дымовых труб, токсичные выбросы от автомобилей, пожары, взрывы, выветривание почвы в результате земледелия и открытой добычи ископаемых. Все это дает поступление $(3-4) \cdot 10^8 \text{ т}$ аэрозолей в атмосферу за год. Концентрация аэрозольного смога, обусловленная фотохимическими реакциями с выхлопными газами, в промышленных центрах достигает 200 мкг/м^3 (Хргиан, 1986), что вполне сравнимо с последствиями пылевых бурь.

Промышленные и аварийные выбросы вредных веществ в атмосферу представляют собой непосредственную опасность для окружающей среды и населения. Во-первых, процессы переноса примесей в атмосфере настолько динамичны, что последствия таких выбросов сказываются практически сразу. Во-вторых, при выбросах в атмосферу загрязняется приземный слой воздуха и подстилающая поверхность (почва, водоемы, растительность), что приводит к непосредственному воздействию на окружающую среду и представляет собой последующую угрозу поступления вредных веществ в организм человека и животных.

Мощные или регулярные выбросы в атмосферу могут иметь и глобальные последствия. Поступление в атмосферу окислов серы, азота и хлора приводит к образованию водяных капель, содержащих кислоты, и к выпадению кислотных осадков; выбросы окислов углерода сказываются на теплообмене в нижних слоях атмосферы и способствуют глобальному потеплению климата. Проведенные в 40–60-х годах воздушные ядерные взрывы на десятилетия изменили баланс радиоактивных веществ в атмосфере и вызвали выпадения радиоактивных осадков (Юнге, 1965; Стыро, 1968; Грин, Лейн, 1972; Кароль, 1972); широкое применение хлор(бром)содержащих фреонов, а также выброс соединений азота повлияли на состав аэрозолей в тропосфере и озоновый слой земной атмосферы (Петрянов-Соколов, Сутугин, 1989; Владимиров и др., 1991); выбросы радиоактивных веществ в результате Кыштымской и Чернобыльской аварий надолго нарушили нормальную жизнедеятельность в районах этих аварий (Владимиров и др., 1991; Кабакчи, Путилов, 1995). Из этих примеров видно, что экологическая

опасность различного рода газообразных и аэрозольных выбросов в атмосферу заключается не только в непосредственном влиянии вредных выбрасываемых веществ на здоровье человека, но и имеет глобальный аспект, связанный с долговременными процессами изменения химического и дисперсного состава загрязнений, переносом веществ в тропосфере и стратосфере, влиянием загрязнений на массовые балансы веществ и температурные режимы в атмосфере.

Не следует полагать, что аэрозоли наносят только вред и должны применяться лишь с известными мерами предосторожности. Они широко используются в технологических процессах пищевой промышленности, применяются в медицине, служат для борьбы с сельскохозяйственными вредителями, являются необходимым элементом в физических установках и промышленных процессах, используются для изготовления материалов со многими полезными свойствами (Спурный и др., 1964; Грин, Лейн, 1972; Петрянов-Соколов, Сутугин, 1989). Интересную историю имеет деятельность, связанная с применением аэрозолей для активного воздействия на облачные процессы (засев облаков) и борьбы с засухой. В основе этой идеи лежало желание использовать неустойчивость и огромные запасы энергии атмосферных облачных систем путем засева облаков искусственными ядрами конденсации. Первые опыты такого рода были проведены во время Второй мировой войны, а подходящие ядра конденсации в виде частиц йодистого серебра были найдены в конце 40-х годов. Успешные полномасштабные опыты были проведены в засушливых штатах США и в Австралии. Однако после постоянного применения засева облаков в течение нескольких лет этот метод перестал приносить результаты и даже наблюдалась обратная картина с повышением длительности засушливых периодов. Подробный анализ и статистику этих экспериментов можно найти в книге (Деннис, 1980).

1.2. Основные характеристики частиц дисперсной фазы

Отдельные частицы характеризуются так называемыми морфологическими признаками: размер, плотность, форма, структура, химический состав.

По форме различают три вида частиц (Райст, 1987): изометрические (с приблизительно одинаковыми размерами в трех направлениях), пластинки (с одним размером, гораздо меньшим, чем два других), волокна или цепочки (протяженные в одном направлении). Форму пластинок обычно имеют частицы пыли, цепочечные агрегаты часто образуются при горении. Твердые аэрозольные частицы в основном имеют неправильную форму, и им приписывается некий средний размер, например, по объему или по проекционной площади. Очень полезным является понятие эквивалентного аэродинамического диаметра, за который принимается диаметр сферической частицы плотностью 1 г/см^3 , имеющей

такую же скорость осаждения, как и данная частица. Это означает, что частицы различной плотности и формы имеют один и тот же аэродинамический диаметр, если их скорости осаждения равны. Применение этой величины удобно для расчетов выпадения частиц в поле тяжести, например применительно к переносу аэрозолей в атмосфере. Средняя плотность частиц может сильно отличаться от плотности исходного вещества. В связи с этим особый интерес представляют так называемые фрактальные агрегаты (Емец и др., 1994), которые образуются, например, при коагуляции дымовых частиц или ледяных кристаллов в облаках и представляют собой рыхлые структуры с необычной связью между линейными размерами и плотностью (хлопья, снежинки). При этом приходится вводить дополнительную переменную, называемую фрактальной размерностью частиц.

Химический состав частиц может быть самым разнообразным и определяется как исходными материалами, так и способами создания этих частиц. В некоторых случаях приходится иметь дело с композитными частицами, составленными из нескольких химических веществ. Например, кислотные осадки состоят из раствора кислоты в воде; радиоактивные частицы, образующиеся при авариях с диспергированием ядерных материалов, включают в себя не только радиоактивные вещества, но и материалы теплоносителя или грунт и т. д.

Набор частиц в единице объема характеризуется функцией распределения по размерам $n(r, \mathbf{x}, t)$, которую называют также спектром частиц. В дальнейшем все частицы мы будем считать сферическими, не обращая внимания на их форму. Вместо радиуса частиц r можно использовать их массу (объем) g и спектр $C(g, \mathbf{x}, t)$, который связан с $n(r, \mathbf{x}, t)$ соотношением $n(r) dr = C(g) dg$, т. е. $n(r) = 4\pi\rho_p r^2 C(g)$, где ρ_p — плотность частиц. Важными характеристиками являются интегральные по спектру величины N и M , называемые счетной и массовой концентрациями:

$$N(\mathbf{x}, t) = \int_0^\infty C(g, \mathbf{x}, t) dg; \quad M(\mathbf{x}, t) = \int_0^\infty g C(g, \mathbf{x}, t) dg. \quad (1.1)$$

Удобным и очень наглядным является представление спектров в виде кумулятивных функций распределения, которые интегрируют характеристики частиц от 0 до данного значения g : $J(g, p) = \int_0^g s^p C(s) ds$.

Например, $J(g, 0)$ — счетная концентрация частиц, имеющих массу меньше g , $J(g, 1)$ — массовая концентрация таких частиц и т. д. Суммарные величины (1.1) могут использоваться в этом случае для нормировки кумулятивных распределений.

При описании спектров композитных частиц важно иметь информацию не только об их распределении по размерам или по массе,

но и о содержании определенных примесей в спектре. Например, для радиоактивных выбросов важно знать функцию распределения активности частиц в зависимости от их аэродинамического диаметра, поскольку такая информация необходима для описания картины радиоактивных выпадений; для кислотных осадков необходимо знать процентное содержание кислоты в водяных каплях и т.д. Для этого вводится дополнительная зависимость спектров от содержания примеси в частице.

На практике спектр частиц получают в отдельных измерениях n_i , r_i , в результате которых спектр можно представить в виде гистограмм. При обработке результатов полезно использовать понятия: счетный медианный размер частиц в системе — размер, вплоть до которого содержится 50 % числа частиц; массовый размер частиц — 50 % массы частиц и т.д. (Райст, 1987). Используются различные виды аппроксимации результатов измерений в виде непрерывных зависимостей $n(r)$, $C(g)$. Одним из часто применяемых распределений, хорошо описывающих реальные спектры аэрозолей, является так называемое логнормальное распределение:

$$f(x) = \frac{1}{x\sqrt{2\pi} \ln \sigma} \exp \left[-\frac{\ln^2(x/\zeta)}{2 \ln^2 \sigma} \right];$$

$$J(a) = \int_0^a f(x) dx = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \Phi \left[\frac{\ln(a/\zeta)}{\sqrt{2} \ln \sigma} \right] \right\}, \quad (1.2)$$

где Φ — интеграл вероятности. Интеграл от $f(x)$ нормирован на единицу, поскольку $J(\infty) = 1$, а параметр ζ совпадает с медианным значением x , так как $J(\zeta) = 0,5$. Распределение (1.2) обладает следующим полезным свойством: умножение $f(x)$ на степенную функцию x^p также дает логнормальное распределение, при этом σ не меняется, а $\zeta(p) = \zeta \exp(p \ln^2 \sigma)$. Например, если (1.2) описывает распределение *числа* частиц по их радиусу $n(r)$ и ζ представляет собой *счетный* медианный радиус, то значение *массового* медианного радиуса $\zeta_m = \zeta \exp(3 \ln^2 \sigma)$.

В качестве примера на рис. 1.1 приведен типичный спектр частиц для аэрозольной составляющей земной атмосферы (Юнге, 1965). Характерно степенное поведение спектров в диапазоне 0,1–1,0 мкм. Причина этого будет выяснена в главе по кинетике коагуляции. В приземном слое воздуха концентрации N в этом диапазоне размеров изменяются в пределах от 10^1 част./см³ (над океаном) до 10^3 част./см³ (над сушей). Характерные размеры частиц Айткена $r_A \approx 0,03$ мкм, концентрация N_A колеблется от 10^4 част./см³ (в сельской местности) до 10^5 част./см³ (в промышленных регионах). Типичные спектры капель в атмосферном водяном облаке показаны на рис. 1.2 (Волощук, Седунов, 1975). Счетная концентрация капель $N \sim 10^2$ – 10^3 част./см³,

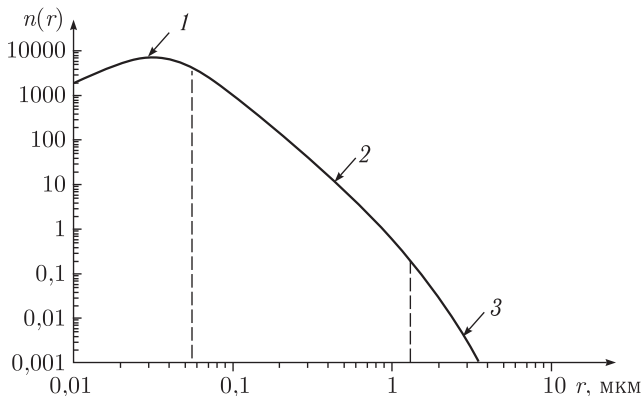


Рис. 1.1. Спектр аэрозольных частиц в атмосфере ($N \sim 3 \cdot 10^4$ част./см³): 1 — частицы Айткена; 2 — спектры Юнге; 3 — гигантские частицы

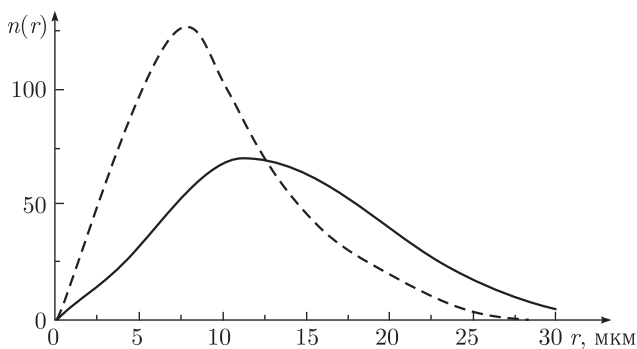


Рис. 1.2. Спектр капель в атмосферном водяном облаке ($N \sim 100$ – 200 част./см³; $M \sim 0,1$ – 10 г/м³; $r_m \sim 4$ – 8 мкм)

массовая концентрация (водность) M достигает 10 – 20 г/м³. Характерные размеры капель в облаке составляют 1 – 10 мкм, что гораздо меньше размеров капель в осадках — $0,1$ – $1,0$ мм. Причиной этому служит укрупнение капель за счет конденсации и коагуляции.

Спектр частиц определяет макроскопическое поведение ансамбля частиц дисперсной фазы и в конечном счете от него зависят газодинамическое движение, оптические и диффузионные свойства аэрозольного облака (перенос облака в атмосфере ветром, диффузия в атмосферных турбулентных пульсациях, осаждение в поле тяжести, оптическая видимость облака и т. д.). Отметим, что спектры атмосферных аэрозолей очень разнообразны и подвержены сильным изменениям. Наиболее существенным является изменение дисперсного состава аэрозолей в результате процессов обмена частиц с паром (испарения и конденсации)

и процессов слияния частиц в результате парных столкновений (коагуляции).

Процессы конденсации и испарения зависят от концентрации паров данного вещества в среде-носителе и определяются разностью между приходом и уходом молекул с поверхности капли. Процесс коагуляции отражает общую термодинамическую неустойчивость дисперсной фазы, обладающей избыточной свободной энергией за счет развитой поверхности. Кроме того, спектр частиц меняется при их дроблении в среде-носителе (под действием скоростного напора в среде, флуктуаций поля скоростей), а также при дроблении в результате парных столкновений. Процессы дробления должны подпитываться энергией от среды-носителя или силового поля.

1.3. Движение частиц в среде-носителе

Кинематика движения отдельной частицы на фоне среды определяется следующим уравнением:

$$m_p d_t \mathbf{v} = \mathbf{F}_w + \mathbf{F}_f, \quad (1.3)$$

где m_p — масса, а $\mathbf{v}$ — скорость частицы; $\mathbf{F}_w$ — сила сопротивления, зависящая от относительной скорости $\mathbf{v} - \mathbf{V}$ ($\mathbf{V}$ — скорость среды) и режима обтекания; $\mathbf{F}_f$ — внешняя сила. Режим обтекания характеризуется значением числа Рейнольдса

$$\text{Re}(|\mathbf{v} - \mathbf{V}|) = 2\rho_m r |\mathbf{v} - \mathbf{V}|/\eta, \quad (1.4)$$

где η — динамическая вязкость; ρ_m — плотность среды. При малых значениях Re сила сопротивления определяется по формуле Стокса

$$\mathbf{F}_w = -6\pi\eta r(\mathbf{v} - \mathbf{V}). \quad (1.5)$$

В общем случае

$$\mathbf{F}_w = -\rho_m \pi r^2 (\mathbf{v} - \mathbf{V}) |\mathbf{v} - \mathbf{V}| C_W(\text{Re})/2, \quad (1.6)$$

где $C_W(\text{Re})$ — так называемый коэффициент лобового сопротивления. Сравнивая (1.5) и (1.6), видим, что в стоксовом режиме $C_W = 24/\text{Re}$. При $\text{Re} \sim 10^3 - 10^5$ зависимость $C_W(\text{Re})$ выходит на плато: $C_W \approx 0,42$ (Седов, 1967). Общий вид $C_W(\text{Re})$ показан на рис. 1.3. При $\text{Re} \approx 4 \cdot 10^5$ имеет место кризис сопротивления, однако для движения аэрозольных частиц в атмосфере такие значения Re нетипичны. Для оценок можно принять, что

$$C_W(\text{Re}) = 24/\text{Re} + 0,42. \quad (1.7)$$

Поправки к формуле Стокса (1.5) возникают и для очень маленьких аэрозольных частиц, размер которых сравним с длиной пробега молекул среды λ_m . При этом вязкий режим обтекания переходит в моле-

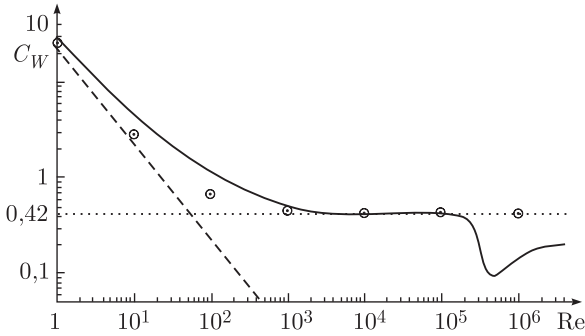


Рис. 1.3. Зависимость C_W от числа Рейнольдса Re ($\odot$ — значения, полученные по формуле (1.7))

кулярный, для которого сила сопротивления должна становиться пропорциональной площади сечения частицы. Соответствующая поправка, найденная Каннингемом, имеет вид (Райст, 1987)

$$\mathbf{F}_w = -6\pi\eta r(\mathbf{v} - \mathbf{V})/C_c; \quad C_c = 1 + \frac{\lambda_m}{r} \left[A + Q \exp\left(-\frac{ar}{\lambda_m}\right) \right], \quad (1.8)$$

где $A = 1,257$; $Q = 0,4$; $a = 1,1$. При этом $C_W(Re) = 24/(Re C_c)$. В пределе $r \ll \lambda_m$ имеем $C_c \approx 1,657\lambda_m/r$ и сила Стокса становится пропорциональной r^2 . Другие поправки к формуле Стокса, которые возникают за счет вязких течений внутри капель и их деформации, приведены в книге (Райст, 1987).

Для иллюстрации приведем несколько оценок для движения частиц в воздухе при нормальном давлении $p = 760$ мм рт.ст. и $T = 20^\circ\text{C}$. Диаметр молекул воздуха $d = 3,6 \cdot 10^{-8}$ см, их масса $m = 4,81 \cdot 10^{-23}$ г, концентрация $n = 2,69 \cdot 10^{19}$ част./см³, средняя тепловая скорость $v_T = \sqrt{8kT/\pi m} = 4,63 \cdot 10^4$ см/с, длина пробега $\lambda_m = 1/(\sqrt{2}\pi d^2 n) = 7 \cdot 10^{-6}$ см = 0,07 мкм. Вязкость воздуха $\eta = mv_T/(3\pi d^2) = 1,82 \times 10^{-4}$ г/(см·с). Для частиц с радиусом $r = 0,01$ мкм поправка Каннингема $C_c = 12,2$, для $r = 0,1$ мкм $C_c = 1,94$, для $r = 1$ мкм $C_c = 1,09$ (далее она пренебрежимо мало отличается от 1). Для частиц, движущихся со скоростью $v = 100$ см/с в покоящейся среде, числа Рейнольдса следующие: $Re = 1,35$ для $r = 10$ мкм; $Re = 13,5$ для $r = 100$ мкм. Выход на постоянный коэффициент лобового сопротивления осуществляется при этом значении v для частиц с $r > 7$ мм.

Основной внешней силой для атмосферных аэрозолей является сила тяжести. Если среда покоится ($\mathbf{V} = 0$), то частицы со временем приобретают стационарную скорость осаждения (седиментации) $u_g(r)$, определяемую из уравнения

$$u_g^2 C_W[Re(u_g)] = \frac{8\rho_p r G}{3\rho_m}, \quad (1.9)$$

где G — ускорение свободного падения. Характерное время τ_s для релаксации скорости в стоксовом режиме движения и значение u_g находятся по формулам

$$\tau_s(r) = \frac{2\rho_p r^2 C_c}{9\eta}; \quad u_{gs}(r) = \frac{2\rho_p r^2 G C_c}{9\eta} = G\tau_s(r). \quad (1.10)$$

В турбулентном режиме обтекания, т. е. при $C_W = \text{const}$,

$$u_{gt}(r) = \sqrt{\frac{8r\rho_p G}{3C_W \rho_m}}; \quad \tau_t(r) = \frac{8r\rho_p}{3C_W \rho_m u_{gt}(r)} = \frac{u_{gt}(r)}{G}. \quad (1.11)$$

Как следует из (1.10), (1.11), зависимости $u_g(r)$ совершенно различны для этих предельных режимов обтекания (при $C_c \approx 1$ $u_{gs} \sim r^2$ и $u_{gt} \sim \sim r^{1/2}$), а времена релаксации полностью определяются стационарным значением скорости: $\tau(r) = u_g(r)/G$.

Для иллюстрации в табл. 1.3 приведены времена релаксации и стационарные скорости осаждения капель воды в воздухе при $T = 20^\circ\text{C}$.

Таблица 1.3. Времена релаксации τ и скорости осаждения u_g капель воды

r , мкм	τ , с	u_g , см/с	r , мкм	τ , с	u_g , см/с
0,01	$1,48 \cdot 10^{-8}$	$1,45 \cdot 10^{-5}$	5	$3,09 \cdot 10^{-4}$	$3,03 \cdot 10^{-1}$
0,05	$9,14 \cdot 10^{-8}$	$8,97 \cdot 10^{-5}$	10	$1,22 \cdot 10^{-3}$	1,20
0,1	$2,35 \cdot 10^{-7}$	$2,31 \cdot 10^{-4}$	20	$4,87 \cdot 10^{-3}$	4,78
0,5	$3,57 \cdot 10^{-6}$	$3,50 \cdot 10^{-3}$	30	$1,09 \cdot 10^{-2}$	10,7
1	$1,31 \cdot 10^{-5}$	$1,29 \cdot 10^{-2}$			

Крупные капли с $r \approx 0,15$ –1 мм осаждаются со скоростями 1,2–6,8 м/с, а далее становятся существенными эффекты их деформации и дробления (Мейсон, 1961).

В качестве другой практически важной задачи рассмотрим плоское одномерное движение частиц в потоке газа, набегающем с постоянной скоростью V , для общего закона торможения (1.7). Если пренебречь силой тяжести, то уравнение движения (1.3) для функции $z = |v - V|$ имеет вид:

$$d_t z = -z(\alpha + \beta z); \quad \alpha = \frac{9\eta}{2\rho_p r^2}; \quad \beta = \frac{3C_W^0 \rho_m}{8\rho_p r}, \quad (1.12)$$

где $C_W^0 = 0,42$; $[\alpha] = 1/T$; $[\beta] = 1/L$. Если начальная скорость частиц $v_0 > V$, то частицы тормозятся до значения $v = V$, а если $v_0 < V$ — ускоряются до $v = V$. Для определенности возьмем случай $v_0 > V$, т. е. $z = v - V$. Введем величину $\gamma = \alpha/\beta$ с размерностью скорости; отношение γ/z характеризует режим обтекания: при $\gamma/z \ll 1$ имеет место

турбулентный режим, а при $\gamma/z > 1$ — стоксов. Решение уравнения (1.12) имеет вид

$$z(t) = \frac{\gamma e^{-\alpha t}}{(z_0 + \gamma)/z_0 - e^{-\alpha t}}; \quad x(t) = \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{\gamma + z_0(1 - e^{-\alpha t})}{\gamma} \right], \quad (1.13)$$

где учтено, что $x(t) = \int_0^t z(\tau) d\tau + Vt$. Отметим, что при $V = 0$ частицы тормозятся на конечном расстоянии $x_T = \beta^{-1} \ln[(\gamma + z_0)/\gamma]$.

При больших относительных скоростях движения может произойти дробление каплей за счет скоростного напора. Устойчивость капли характеризуется лапласовским давлением. Отношение этих величин называется числом Вебера:

$$We = 2\rho_m(\mathbf{v} - \mathbf{V})^2 r / \sigma, \quad (1.14)$$

где σ — поверхностное натяжение. Ясно, что чем больше число Вебера, тем менее устойчива данная капля. Опыты показывают (Волинский, 1986), что при длительном обтекании происходит дробление каплей, у которых $We > We_c = 10$. Характерные времена жизни в турбулентном режиме обтекания следующие (Waldman et al., 1972):

$$T(r, t) = \frac{90r}{|\mathbf{v} - \mathbf{V}|} \left(\frac{\rho_p}{\rho_m} \right)^{1/2} We^{-1/4}(r, t). \quad (1.15)$$

Вероятность дробления на момент времени t

$$Q(r, t) = 1 - \exp \left[- \int_0^t \frac{ds}{T(r, s)} \right], \quad We > We_c, \quad (1.16)$$

поскольку величина $P(r, t) = T^{-1}(r, t)$ определяет вероятность дробления в единицу времени. Для нахождения $Q(r, t)$ из (1.16) необходимо знать всю предысторию движения капли, определяемую уравнением (1.3).

Получим выражение для вероятности дробления капли Q при ее движении в набегающем потоке газа, используя формулы (1.13), (1.15), (1.16). Из (1.15) следует, что

$$T(r, z) = \mu^{-1} z^{-3/2}; \quad \mu = \frac{1}{90} \left(\frac{\rho_m}{\rho_p} \right)^{1/2} \left(\frac{2\rho_m}{\sigma r^3} \right)^{1/4}. \quad (1.17)$$

Заменяя интегрирование по s интегрированием по z , получаем (Пискунов, 1991)

$$\begin{aligned} \Phi(z) &\equiv \int_0^t \frac{ds}{T(s)} = \mu \int_z^{z_0} \frac{\sqrt{z} dz}{\alpha + \beta z} = \frac{2\mu\sqrt{z_0}}{\beta} \Omega(z); \\ \Omega(z) &= \left\{ 1 - \sqrt{\frac{z}{z_0}} - \sqrt{\frac{\gamma}{z_0}} \operatorname{arctg} \left[\frac{\sqrt{\gamma}(\sqrt{z_0} - \sqrt{z})}{\gamma + \sqrt{zz_0}} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Вероятность дробления $Q(z) = 1 - \exp[-\Phi(z)]$. Величина $\mu\sqrt{z_0}/\beta$ имеет простой физический смысл — это отношение характерного времени торможения $\tau_0 = 1/\beta z_0$ к времени дробления $T_0 = T(z_0)$ на начальной стадии полета. Дополнительный множитель Ω в (1.18) учитывает динамику торможения частицы. При нахождении $Q(z)$ следует принять во внимание условие $We > We_c$, т. е. фактический предел интегрирования в (1.18) равен $\max\{z, z_c\}$, где $z_c = \sqrt{\frac{\sigma We_c}{2\rho_m r}}$.

В реальных задачах иногда требуется определить характеристики частиц на некотором фиксированном расстоянии $x(t) \equiv R$. При этом второе равенство (1.13) должно рассматриваться как трансцендентное уравнение для нахождения $t_R \equiv t(R)$, затем из первой формулы (1.13) находится $z_R = z(t_R)$ и, наконец, по (1.18) рассчитывается $Q_R = Q(z_R)$ с учетом того, что $z = \max\{z, z_c\}$. Формулы (1.13), (1.18) полезны, например, для оценки траекторных параметров и вероятностей дробления капель, впрыскиваемых в поток газа. В первом приближении можно считать, что капли дробятся на осколки критического размера: $r_c = \sigma We_c / 2\rho_m z^2$.

1.4. Броуновская диффузия аэрозолей

Мелкие аэрозоли, взвешенные в газовой среде, во многом ведут себя подобно «газу» частиц. За счет столкновений с молекулами они приобретают среднюю скорость теплового движения $v_{pT} = \sqrt{8kT/\pi m_p}$, отвечающую массе аэрозольной частицы m_p и температуре среды T , вносят свой вклад в давление $p_p = NkT$, имеют длину пробега λ_p , обусловленную столкновениями с молекулами газа, выравнивают свою концентрацию в среде аналогично молекулярной диффузии смеси газов. Например, в поле тяжести аэрозоли распределяются по высоте z в соответствии с барометрической формулой

$$C(z) = C(z_0) \exp \left[- \frac{m_p G(z - z_0)}{kT} \right], \quad (1.19)$$

т. е. процесс теплового движения частиц все время поддерживает наиболее мелкие аэрозоли над поверхностью во взвешенном состоянии, препятствуя их осаждению в поле тяжести. Оценивая этот эффект для характерной высоты $(z - z_0) \approx 1$ см и $T \approx 300$ К, видим, что он играет роль для частиц с $m_p \leq 4,2 \cdot 10^{-17}$ г ($r \leq 2,2 \cdot 10^{-2}$ мкм при $\rho_p = 1$ г/см³).

Одним из механизмов пространственной диффузии аэрозолей является броуновское блуждание, которое возникает за счет флуктуации числа столкновений молекул газа с поверхностью частицы. Для нахождения зависимости коэффициентов броуновской диффузии D_b от размеров частиц можно определить среднеквадратичное смещение

частицы $\overline{\Delta x^2} = \frac{kT}{3\pi\eta r} \Delta t$ за время Δt под действием случайной силы (Кикоин, Кикоин, 1976), а затем связать эту величину с выражением $2D_b\Delta t$, получающимся из диффузионной теории. Мы поступим другим образом (Райст, 1987): рассмотрим плоскую стационарную диффузию частиц по оси x и заметим, что наличие градиентов концентрации $\nabla C(x)$ вызывает движение частиц со средней скоростью $\mathbf{u}$, причем поток через единицу площади равен $\mathbf{J} = -D_b \nabla C(x) = \mathbf{u}C(x)$. Градиент осмотического давления $\nabla p(x) = kT \nabla C(x)$ в равновесии должен компенсироваться объемными силами, действующими на частицы. В нашем случае это силы торможения (1.8), следовательно, $kT \nabla C(x) = -\mathbf{F}_w(\mathbf{u})C$. Вводя величину $b = u/F_w$, называемую подвижностью частицы и означающую скорость, приобретаемую частицей под действием единичной силы, получаем с учетом (1.8) при $V = 0$

$$D_b = bkT; \quad b = \frac{C_c}{6\pi\eta r}. \quad (1.20)$$

Отметим, что коэффициент броуновской диффузии не зависит от плотности частицы и определяется только ее геометрическими размерами. В табл. 1.4 приведены значения поправки Каннингема и коэффициентов броуновской диффузии для частиц различных размеров.

Таблица 1.4. Значения C_c и D_b в воздухе при $T = 20^\circ\text{C}$

r , мкм	C_c	D_b , см ² /с	r , мкм	C_c	D_b , см ² /с
0,001	116,6	$1,37 \cdot 10^{-2}$	0,5	1,176	$2,77 \cdot 10^{-7}$
0,005	23,78	$5,61 \cdot 10^{-4}$	1	1,088	$1,28 \cdot 10^{-7}$
0,01	12,19	$1,44 \cdot 10^{-4}$	5	1,018	$2,40 \cdot 10^{-8}$
0,05	3,015	$7,11 \cdot 10^{-6}$	10	1,009	$1,19 \cdot 10^{-8}$
0,1	1,938	$2,29 \cdot 10^{-6}$			

При вычислении эффективной длины пробега частицы следует иметь в виду, что не каждое столкновение с молекулами среды приводит к значительному изменению ее скорости. Длину пробега проще всего найти непосредственно из формулы для коэффициентов диффузии:

$$\lambda_{pb} = \frac{3D_b}{(8kT/\pi m_p)^{1/2}}. \quad (1.21)$$

В диапазоне размеров $r = 0,01$ – $1,00$ мкм длина пробега аэрозольных частиц в воздухе при нормальных условиях меняется слабо и составляет сотые доли микрометра, что в несколько раз меньше пробега молекул воздуха.

Броуновская диффузия субмикронных аэрозолей играет важную роль при поглощении частиц в дыхательных путях и легких, широко

используется для измерения размеров частиц с помощью так называемых диффузионных батарей. Для оценки этих эффектов обратимся к процессам осаждения частиц различных размеров при течении в тонких каналах (трубках) (Райст, 1987). В зависимости от геометрических размеров канала и скорости течения u может реализоваться либо ламинарный, либо турбулентный режим. При стационарном течении в начале канала образуется ламинарный пограничный слой, толщина которого δ растет с расстоянием x по направлению потока:

$$\delta = 5\sqrt{\frac{x\nu}{u}} = \frac{5x}{\sqrt{\text{Re}_x}}; \quad \text{Re}_x = \frac{ux}{\nu}, \quad (1.22)$$

где $\nu = \eta/\rho_m$ — кинематическая вязкость; ρ_m — плотность среды. В том случае, когда толщина пограничного слоя δ сравнивается с радиусом трубки R , устанавливается параболический профиль скоростей (течение Пуазейля). Это происходит при $x = Q/(25\pi\nu)$, где $Q = u\pi R^2$ — объемная скорость прокачки. С увеличением расстояния x ламинарный пограничный слой становится неустойчивым и течение переходит в турбулентный режим, критерием возникновения которого является рост чисел Рейнольдса до $\text{Re}_x \approx 10^4$ – 10^6 . В дальнейшем нас будет интересовать ламинарный режим течения, в котором определяющим является процесс осаждения частиц на стенках за счет броуновской диффузии, а турбулентная диффузия пренебрежимо мала. Кроме того, будем пренебрегать процессами гравитационного осаждения частиц на стенки.

Отношение концентраций аэрозолей на выходе и входе трубки P , которое мы будем называть эффективностью прохождения, зависит от размеров частиц. Приближенно можно оценить значение P следующим образом. Если рассмотреть одномерную задачу о диффузии аэрозолей у поглощающей стенки с постоянной начальной концентрацией C_0 , то за время t на единицу поверхности осядет $N(t) = C_0\sqrt{4Dt/\pi}$ частиц. При прокачке частицы проводят в трубке время $t = L/u$ и оседают из объема $V = \pi R^2 L$ на поверхность с площадью $S = 2\pi RL$. Следовательно,

$$P = 1 - N\left(\frac{L}{u}\right) \frac{S}{C_0} V = 1 - \frac{4}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\Phi}; \quad (1.23)$$

$$\Phi = \frac{DL}{uR^2} = \frac{\pi DL}{Q}, \quad \Phi \ll 1.$$

Это довольно грубая оценка, поскольку не принималась во внимание цилиндрическая геометрия системы и пренебрегалось изменением концентрации вдоль длины трубки, но зависимость P от основных параметров передается в этой оценке правильно. Наиболее важной является зависимость эффективности P от размеров частиц (поскольку от r зависят значения коэффициента броуновской диффузии D_b), что позво-

ляет использовать результаты измерения P для нахождения размеров частиц в микронном и субмикронном диапазонах. При этом число частиц на входе и выходе можно определить, например, с помощью лазерного счетчика аэрозолей (Жуланов и др., 1983). Более точные расчеты в сочетании с экспериментальной калибровкой дают для ламинарного режима течения в трубке следующие, широко используемые на практике зависимости эффективности прохождения («проскока») P от безразмерного параметра $\Phi = \frac{\pi D_b L}{Q}$ (Райст, 1987):

$$\begin{aligned} P(\Phi) &= 1 - 2,56\Phi^{2/3} + 1,2\Phi + 0,177\Phi^{4/3}; \\ P(\Phi) &= 0,819e^{-3,65\Phi} + 0,097e^{-22,3\Phi} + 0,032e^{-57\Phi} + \\ &\quad + 0,027e^{-123\Phi} + 0,025e^{-750\Phi}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Одним из приборов, используемых для измерения параметров аэрозолей, является портативная диффузионная батарея Синклера (Райст, 1987). Она имеет длину 3,5 см, диаметр 4,45 см и состоит из $k = 14\,500$ каналов диаметром 0,023 см. Наличие большого числа каналов позволяет получать доступные для измерения величины $1 - P$ (эффективности улавливания) для субмикронных частиц и реальных скоростей прокачки $Q = 1\text{--}100$ л/мин, поскольку расход через каждую трубку $Q_k = Q/N$ незначителен. Пользуясь приведенными выше формулами, проведем расчет для работы батареи Синклера при скорости прокачки $Q = 1$ л/мин и частиц с радиусом 0,05 мкм. Расход в каждой трубке $Q_k = 1,15 \cdot 10^{-3}$ см³/с, скорость течения $u = 2,77$ см/с. В воздухе при $T = 20^\circ\text{C}$ $\nu = 0,152$ см²/с. Исходя из формулы (1.22), легко подсчитать, что пуазейлев режим течения реализуется на расстоянии $x \approx 10^{-3}$ см, а переход течения при $x = L$ в турбулентный режим заведомо не наступает. Для частиц с радиусом 0,05 мкм из табл. 1.4 находим коэффициент броуновской диффузии $D_b = 7,11 \cdot 10^{-6}$ см²/с, сле-

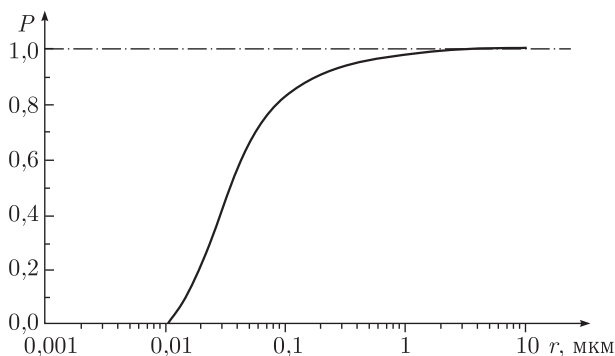


Рис. 1.4. Зависимость эффективности P для батареи Синклера при скорости прокачки 1 л/мин

довательно, значение безразмерного параметра $\Phi = 6,8 \cdot 10^{-2}$. Подсчет эффективности прохождения P по формулам (1.24) дает примерно одинаковые результаты: $P = 0,66$, т. е. эффективность улавливания $1 - P$ вполне доступна для измерений. На рис. 1.4 показано, как зависит эффективность P при указанных выше параметрах среды и течения от размеров частиц в диапазоне размеров $r = 0,01 - 1$ мкм, а для измерения в других диапазонах необходимо менять значение Q .

В заключение отметим, что процессы броуновской диффузии частиц важны не только для дисперсных систем, используемых в лабораторных и физических установках, но и для аэрозолей, находящихся в атмосфере. Хотя в атмосферных условиях процессы переноса за счет броуновского движения явно подавлены интенсивной турбулентной диффузией, имеющей на много порядков большие значения D , они по-прежнему продолжают играть важную роль в динамике осаждения частиц в приземном слое и кинетике формирования спектров частиц.

1.5. Процессы конденсации и испарения капель

Перечень природных и техногенных явлений и процессов, в которых конденсация и испарение играют важную роль, очень разнообразен: аккреция газовых и пылевых облаков космическими телами; формирование частиц при ударе метеоритов о поверхность и при вулканических извержениях; круговорот воды и ее паров в атмосфере; формирование и выпадение осадков; образование аэрозолей в облаке ядерного взрыва или в источниках промышленных и аварийных выбросов; эволюция газовых и кислотных загрязнений в атмосфере; применение диспергированных летучих веществ в камерах сгорания; формирование конденсационных следов за судами и самолетами и образование конденсационных треков при регистрации элементарных частиц в камере Вильсона; использование конденсационных процессов для промышленного изготовления пищевых продуктов и кислот.

С физической точки зрения процессы обмена между газовой и конденсированной фазами относятся к кинетике фазовых переходов и прежде всего определяются термодинамическими условиями сосуществования фаз. Давление насыщенного пара над плоской поверхностью $P_s(T)$ в зависимости от температуры T является важной характеристикой конденсирующегося вещества. Оно экспериментально измерено для большинства используемых на практике жидкостей и металлов в расплавленном состоянии. Величину $S = p_v/P_s$, где p_v — парциальное давление паров конденсирующегося вещества, называют пересыщением; при $S > 1$ происходит конденсация, а при $S < 1$ — испарение с плоской поверхности. В табл. 1.5 приведены значения парциального давления P_s и плотности ρ_s насыщенных паров воды для различных температур T (Мак-Картни, 1979).

Обратим внимание на сильный рост величин P_s , ρ_s с увеличением температуры. Зависимость давления насыщенного пара от температуры

Таблица 1.5. Давление насыщенных паров воды в зависимости от температуры

Температура, °С	−20	−10	−0	0	10	20	30
P_s , мбар*, над водой	1,25	2,86	6,11	6,21	12,3	23,4	42,4
ρ_s , г/м ³ , над водой	1,07	2,36	4,85	4,85	9,40	17,3	30,4
P_s , мбар, надо льдом	1,03	2,60	6,11	—	—	—	—
* 1 мбар = 10^3 дин/см ² = 10^2 Па.							

$P_s(T)$ в справочной литературе обычно представляется в виде интерполяции

$$P_s(T) = \exp \left\{ -\frac{A_s}{T} + B_s + C_s \ln T + D_s T \right\}, \quad (1.25)$$

где A_s , B_s , C_s , D_s — некоторые константы. Если выражать T в кельвинах, а P_s в паскалях, то для давления паров над водой $A_s = 7,235 \cdot 10^3$; $B_s = 77,376$; $C_s = -8,21$; $D_s = 5,8 \cdot 10^{-3}$.

Давление насыщенного пара $p_s(r)$ над каплей радиусом r больше, чем над плоской границей раздела P_s , причем $p_s(r)$ возрастает с уменьшением r (формула Томсона):

$$p_s(r, T) = P_s(T) \exp \left(\frac{2\sigma q}{rkT} \right), \quad (1.26)$$

где σ — поверхностное натяжение; $q = A_p/\rho_p N_A$ — объем молекулы жидкости; A_p — молекулярная масса конденсирующегося вещества. Следовательно, если в объеме присутствуют капельки жидкости и пересыщенный пар с давлением p_v , то существует размер каплей (критический радиус)

$$r_* = \frac{2\sigma q}{kT \ln S}, \quad (1.27)$$

для которого давление паров $p_s(r_*)$ в точности равно p_v . Капельки критического размера находятся в неустойчивом равновесии с паром. Для капелек с $r < r_*$ давление $p_s(r) > p_v$, и они должны испаряться, а у капелек с $r > r_*$ давление $p_s(r) < p_v$, поэтому они должны расти. Таким образом, в дисперсной капельной системе процесс конденсации протекает качественно иначе, чем над плоской поверхностью, и требуется наличие жизнеспособных каплей с размерами $r > r_*$, чтобы происходили конденсационные процессы.

В атмосфере конденсация облегчается наличием частичек пыли, которые уже имеют достаточный размер, чтобы на них начали конденсироваться пары воды (гетерогенная нуклеация). Именно это свойство легло в основу регистрации субмикронных атмосферных аэрозолей с помощью расширяющейся камеры, изобретенной Айткеном в конце позапрошлого века. Данные табл. 1.5 помогают найти критические

радиусы капель или кристалликов льда, а также оценить размеры частиц, которые могут служить эффективными ядрами конденсации. Так, например, при температуре $T = 10^\circ\text{C}$ и плотности паров воды 15 г/м^3 давление $p_v = 19,58$ мбар, пересыщение $S = 1,6$ и критический размер капелек $r_* = 2,33 \cdot 10^{-3}$ мкм, т.е. частицы Айткена с $r_a \approx 0,03$ мкм вполне могут служить ядрами конденсации.

Зарождение жизнеспособных капель, имеющих размер порядка r_* , происходит и в чистом паре за счет флуктуационного образования комплексов молекул. Этот процесс называют гомогенной нуклеацией. Ясно, что образование крупных комплексов, составленных из сотен тысяч молекул, крайне маловероятно, поэтому для флуктуационного появления капель в реальности требуются большие пересыщения S , для которых масса критических капель $g_* = 4\pi r_*^3 \rho_p / 3$ составляет $10\text{--}100 m_v$, иначе вероятность такого события очень мала. Число капель, рождающихся в единицу времени в единице объема, определяется следующим выражением (Зельдович, 1942; Френкель, 1975):

$$J = \alpha q n_v^2 \frac{v_v T}{2} \sqrt{\frac{\sigma}{kT}} \exp\left(-\frac{4\pi\sigma r_*^2}{3kT}\right) = \alpha n_v^2 q \sqrt{\frac{2\sigma}{\pi m_v}} \exp\left(-\frac{g_* \ln S}{2m_v}\right), \quad (1.28)$$

где $n_v = \rho_v / m_v$ — счетная концентрация пара; α — коэффициент аккомодации (для воды $\alpha \approx 0,03$). Видно, что с уменьшением S и ростом g_* интенсивность J резко падает, как это и должно быть по физическому смыслу. Результаты расчета J для различных пересыщений водяного пара при $T = 10^\circ\text{C}$ приведены в табл. 1.6.

Видно, что процесс флуктуационного образования капелек носит явно выраженный пороговый характер и начинается в данных условиях для пересыщений $S > S_{\text{cr}} \approx 4$. Значения S_{cr} для ряда паров других летучих жидкостей приведены в книге (Грин, Лейн, 1972).

Отметим, что существует ряд факторов, снижающих давление насыщенного пара и облегчающих процесс конденсации: присутствие в капелке растворимых соединений (солевых частиц), наличие заряда у частиц и т.д. (Мейсон, 1961; Френкель, 1975; Райст, 1987). С помощью конденсационных треков регистрируются заряженные частицы в камере Вильсона, которая, по сути дела, является модификацией

Таблица 1.6. Параметры флуктуационно рождаемых капелек воды при $T = 10^\circ\text{C}$

Пересыщение S	3	4	5	6
Плотность пара ρ_v , г/м ³	2,82	3,76	4,70	5,64
r_* , 10^{-4} мкм	9,89	7,84	6,75	6,06
Число молекул в капле g_*/m_v	135,5	67,45	43,11	31,24
Интенсивность J , част./ (см ³ ·с)	$4,54 \cdot 10^{-9}$	$8,60 \cdot 10^3$	$2,34 \cdot 10^9$	$2,74 \cdot 10^{12}$

камеры Айткена. Наличие заряда снижает по сравнению с (1.26) давление насыщенных паров над каплей следующим образом (Френкель, 1975; Райст, 1987):

$$p_s(r, T) = P_s(T) \exp \left\{ \frac{q}{kT} \left[\frac{2\sigma}{r} - \frac{(fe)^2}{8\pi r^4} \left(\frac{1}{\varepsilon_0} - \frac{1}{\varepsilon} \right) \right] \right\}, \quad (1.29)$$

где e — заряд электрона ($4,8 \cdot 10^{-10}$ ед. СГСЭ); f — число элементарных зарядов в капле; ε — диэлектрическая проницаемость капли (для воды $\varepsilon = 81$); ε_0 — диэлектрическая проницаемость среды (для воздуха $\varepsilon_0 = 1$). На рис. 1.5 показано поведение величины $Q(r) = p_s(r)/P_s$ для капель воды, имеющих единичный заряд ($f = 1$) и находящихся в воздухе при $T = 10^\circ\text{C}$. Значения Q характеризуют отличие давления насыщенного пара над каплей от давления над плоской границей раздела, обусловленное зарядом и кривизной поверхности. На рис. 1.5 штрихпунктирной линией показано также поведение Q для незаряженной капли.

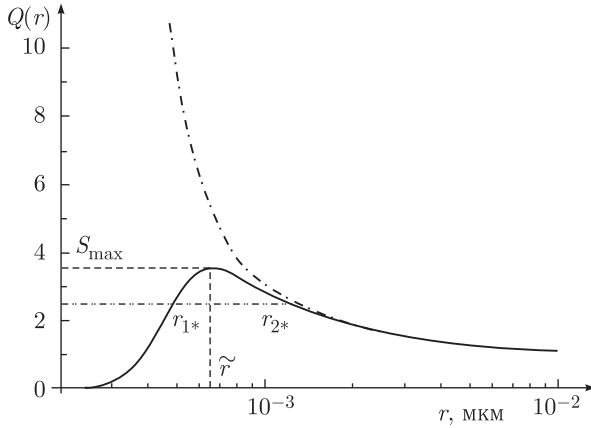


Рис. 1.5. Поведение $Q(r) = p_s(r)/P_s$ для капель воды в воздухе: сплошная кривая — уравнение (1.29), штрихпунктирная кривая — уравнение (1.26)

Видно, что при $r \rightarrow 0$ давление насыщенного пара над поверхностью заряженной капли стремится к нулю, поэтому конденсационный рост мелких капель идет даже при $S < 1$, когда пар не насыщен. Кроме того, давление $p_s(r, T)$ для заряженных капель имеет максимум при $r = \tilde{r}$:

$$\tilde{r} = \left[\frac{(fe)^2(\varepsilon_0^{-1} - \varepsilon^{-1})}{4\pi\sigma} \right]^{1/3};$$

$p_{s \max}(r, T) = p_s(\tilde{r}, T) = P_s(T) \exp(3\sigma q/2\tilde{r}kT)$, поэтому для пересыщенных $S > S_{\max} \equiv \exp(3\sigma q/2\tilde{r}kT)$ давление пара $p_v > p_{s \max}$, следова-

тельно, будут расти капельки любых размеров. В общем случае уравнение для нахождения критического размера r_*

$$\ln S = \frac{q}{kT} \left[\frac{2\sigma}{r_*} - \frac{(fe)^2}{8\pi r_*^4} \left(\frac{1}{\varepsilon_0} - \frac{1}{\varepsilon} \right) \right] \quad (1.30)$$

имеет один корень при $S < 1$ и не имеет корней при $S > S_{\max}$. При $1 < S < S_{\max}$ уравнение (1.30) имеет два корня r_{1*} , r_{2*} , причем капельки в диапазоне размеров $r_{1*} < r < r_{2*}$ испаряются, а при $r < r_{1*}$ и $r > r_{2*}$ — растут.

Займемся теперь скоростями процесса роста (испарения) отдельной капли. Обычно пары конденсирующегося вещества имеют концентрацию, гораздо меньшую, чем основная среда (например, воздух), и подвод паров к капле осуществляется путем диффузии паров в среде. Пробег молекул пара в среде λ_v и коэффициент диффузии D_v определяются выражениями

$$\begin{aligned} \lambda_v &= \left[\sqrt{2} n_v \pi d_v^2 + \frac{\rho_m N_A}{A_m} \pi \frac{(d_v + d_m)^2}{4} \sqrt{1 + \frac{A_v}{A_m}} \right]^{-1} \approx \\ &\approx 4\lambda_m \sqrt{\frac{2A_m}{A_v + A_m}} \left(\frac{d_v}{d_m + d_v} \right)^2; \quad D_v = \lambda_v v_v T / 3, \end{aligned}$$

где $v_v T = \sqrt{8kT/\pi m_v}$; m_v — масса молекулы пара; λ_m — пробег молекул среды; A — молекулярные массы; d — диаметры молекул, при этом индекс m помечает среду, а v — пар. В диффузионном режиме подвода пара к капле легко определить стационарный поток I , выраженный числом поглощаемых каплей молекул в единицу времени, и скорость изменения массы капельки (здесь r — радиус капли, а $g = m_p$ — ее масса):

$$\begin{aligned} I &= \frac{4\pi r D_v [p_v - p_s(r)]}{kT}; \quad d_t g = m_v I = 4\pi r D_v \rho_v \left[1 - \frac{p_s(r)}{p_v} \right]; \\ \frac{p_s(r)}{p_v} &= \exp \left[\left(\frac{r_*}{r} - 1 \right) \ln S \right]. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Поскольку конденсация происходит с выделением тепла, то температура капельки T_r повышается по сравнению с температурой среды T . Значение T_r находят из условия теплового баланса, приравнявая тепловыделение в единицу времени потоку тепла в окружающий воздух:

$$L d_t g = L m_v I = 4\pi r \chi (T_r - T); \quad (T_r - T) = \frac{m_v L D_v [p_v - p_s(r, T_r)]}{\chi k T}, \quad (1.32)$$

где L — удельная теплота испарения; χ — теплопроводность воздуха. При этом необходимо учитывать, что давление насыщенного

пара вблизи поверхности капли $p_s(r, T_r)$ резко зависит от ее температуры T_r . Фактически (1.32) является трансцендентным уравнением для определения T_r , для решения которого необходимо дополнительно использовать зависимость (1.25). Уравнения (1.31), (1.32) обычно называют формулами Максвелла. Очевидно, что они применимы и для процесса испарения капли, при этом (1.32) описывает понижение ее температуры. Обычно эффекты изменения температуры капель довольно малы, но они могут значительно уменьшить скорость конденсации (испарения) $d_t g$. Некоторые оценки разности $T_r - T$, возникающей при конденсации паров серной кислоты, приведены в монографии (Амелин, 1972). Оценки скоростей изменения размеров капель при испарении и конденсации приведены в работах (Фукс, 1958; Грин, Лейн, 1972; Райст, 1987).

Для капель, размер которых меньше или сравним с величиной λ_v , требуются поправки к полученным выражениям для скорости роста. В свободномолекулярном режиме подвода пара к капле значение I должно определяться газокинетическим потоком молекул:

$$I = \alpha \pi r^2 v_{vT} [n_v - n_s(r)],$$

где α — коэффициент аккомодации. При $\alpha = 1$ для сшивки этого выражения с предыдущими результатами достаточно разделить его на величину $1 + 3r/4\lambda_v$ (Сутугин, Токар, 1985). Легко убедиться, что в пределе $r \gg \lambda_v$ мы получим прежнее выражение (1.31), поскольку $D_v = \lambda_v v_{vT}/3$. Вопрос корректной сшивки диффузионного и свободномолекулярного потоков с учетом реальных значений α является довольно проблематичным (Фукс, 1958; Грин, Лейн, 1972). Например, в монографии (Амелин, 1972) для этой цели используется целый набор параметров. Для оценок в дальнейшем мы будем использовать следующую достаточно простую интерполяцию для скоростей роста капель:

$$\begin{aligned} d_t g \equiv v(r) &= \frac{\alpha \pi r^2 \rho_v v_{vT}}{(1 + 3r\alpha/4\lambda_v)} \left[1 - \frac{p_s(r)}{p_v} \right]; \\ \frac{p_s(r)}{p_v} &= \exp \left[\left(\frac{r_*}{r} - 1 \right) \ln S \right]. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Отметим, что при $S < 1$ в расчетах по формулам (1.31), (1.33) следует сохранять отрицательный знак у r_* , получающийся из (1.27), поскольку $r_* \ln S = 2\sigma q/kT > 0$.

В качестве примера оценим времена испарения достаточно крупных капель при $S < 1$. Считая режим испарения диффузионным и пренебрегая отличием $p_s(r)$ от P_s , получим из (1.31) уравнение, интегрирование которого дает формулу для изменения размеров капли. В частности,

выражение для времени полного испарения t_v капли, имевшей начальный радиус R , выглядит следующим образом (уравнение Ленгмюра):

$$t_v = \frac{\rho_p R^2}{2D_v(\rho_s - \rho_v)}. \quad (1.34)$$

Отличием $p_s(r)$ от P_s можно пренебречь даже для мелких капель, размер которых $r \gg 2\sigma q/kT$. Подстановка численных значений для водяных капель, находящихся в воздухе при $T = 10^\circ\text{C}$, дает ограничение $r > 10^{-2}$ мкм. Пробег молекул паров воды в воздухе при $T = 10^\circ\text{C}$ составляет $\lambda_v = 0,088$ мкм ($D_v = 0,23$ см²/с), следовательно, формула (1.34) должна давать удовлетворительные результаты для испарения капель вплоть до субмикронных размеров $r \sim 0,1$ мкм. Для капли с начальным радиусом $R = 20$ мкм, находящейся в воздухе с 50 %-й влажностью ($S = 0,5$) и температурой $T = 10^\circ\text{C}$, получаем $t_v = 1,85$ с. При падении такая капля пройдет путь менее 9 см, поскольку ее скорость седиментации не превышает 4,8 см/с (см. табл. 1.3).

Для крупных капель важны поправки к скоростям роста, связанные с их движением в среде, например, с оседанием капель в поле тяжести. Эти поправки обычно выражаются через числа Рейнольдса и другие безразмерные величины (Фукс, 1958; Грин, Лейн, 1972).

В целом приведенное выше рассмотрение вполне достаточно для численных оценок влияния конденсационных процессов на поведение частиц в атмосфере и в различного рода физических и промышленных установках. Для процессов образования капельных туманов разнообразные расчеты подробно выполнены в книге (Амелин, 1972); формирование частиц за счет конденсации паров на разлете рассмотрено в работах (Райзер, 1959; Киффер, 1986); некоторые оценки процессов формирования частиц в облаке ядерного взрыва сделаны в статьях (Stewart, 1956; Красилов, Тер-Сааков, 1971); расчеты процессов конденсации паров в камере Вильсона проведены в работе (Голубев и др., 1991). Выражения для скоростей конденсационных процессов будут использоваться нами в дальнейшем при решении различных вариантов кинетического уравнения, описывающего процессы конденсации в ансамблях частиц, а также при создании моделей кинетики, учитывающих влияние конденсации на термодинамические и газодинамические параметры дисперсных систем.

1.6. Коагуляция аэрозолей

Коагуляция представляет собой процесс слияния частиц в результате парных столкновений. При перечислении проблем, в которых коагуляция играет важную роль, можно воспользоваться обширным перечнем, который уже был сформулирован в начале предыдущего раздела по конденсации. Ниже мы приведем несколько простых оценок для двух механизмов коагуляции: под действием броуновского

движения частиц в среде и при ламинарном течении двухфазных смесей в каналах. Первый механизм является решающим для аэрозолей, присутствующих в атмосфере, а также используемых в различного рода установках; второй играет роль для большого ряда технологических процессов.

Наиболее важной характеристикой процесса коагуляции является частота столкновений $K(g, n)$ частиц с массами g и n в единице объема, называемая коэффициентом (ядром) коагуляции и имеющая размерность $[K] = \text{см}^3/\text{с}$. Аналогом K в нейтронной и молекулярной кинетике служит скорость реакции σv . По смыслу K полное число столкновений I в единицу времени в единице объема определяется интегрированием по спектрам частиц:

$$I = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty K(g, s) C(g, t) C(s, t) dg ds,$$

и дает скорость убывания счетной концентрации за счет слияния частиц: $d_t N = -I$. Массовая концентрация частиц при коагуляции не меняется: $M = \text{const}$. В целом слияние частиц приводит к необратимому росту средней массы частиц в спектре: $\bar{g}(t) = M/N(t) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \infty$. Характерные времена процесса коагуляции

$$\tau_c = \left| \frac{N}{d_t N} \right| \approx \frac{2}{K_0 N}, \quad (1.35)$$

где K_0 — усредненное по спектру частиц значение ядра (константа коагуляции). Если выделить типичный размер частиц r и зафиксировать полную массу M аэрозолей в единице объема, то для характерного времени коагуляции τ_c получим формулу, которую удобно использовать, чтобы определить влияние дисперсности аэрозолей на время коагуляции

$$\tau_c(r) = \frac{8\pi\rho_p r^3}{3K_0(r)M}. \quad (1.36)$$

Коэффициенты коагуляции для броуновского движения частиц в диффузионном режиме имеют вид (Smoluchowsky, 1916; Чандрасекар, 1947; Фукс, 1961; Hidy and Brock, 1970; Грин, Лейн, 1972; Райст, 1987):

$$K_d(r_1, r_2) = 4\pi(D_{b1} + D_{b2})(r_1 + r_2), \quad (1.37)$$

где D_{bi} — коэффициент броуновской диффузии i -й частицы в среде, определяемый по формуле (1.20); r_i — радиус частицы. В свободномолекулярном режиме, когда пробег частиц в среде много больше самих размеров частиц, коэффициенты коагуляции следующие:

$$K_{fm}(r_1, r_2) = \left[\frac{8\pi kT(m_{p1} + m_{p2})}{m_{p1} m_{p2}} \right]^{1/2} (r_1 + r_2)^2, \quad (1.38)$$

где m_{pi} — массы частиц. Для сшивки выражений (1.37) и (1.38) используется следующая формула (Hidy and Brock, 1970; Loyalka, 1983):

$$K_b(r_1, r_2) = K_d(r_1, r_2) \left[1 + \text{Kn}_{12} \frac{\zeta + \xi \frac{K_d(r_1, r_2)}{K_{fm}(r_1, r_2)}}{1 + \xi \text{Kn}_{12}} \right]^{-1}, \quad (1.39)$$

где $\zeta = 1,0161$; $\xi = 4/3$; $\text{Kn}_{12} = \lambda_{12}/r_1 + r_2$ — число Кнудсена. Здесь λ_{12} — относительный пробег, а λ_{pi} — эффективный пробег частиц в среде:

$$\lambda_{12} = \lambda_{p1} \sqrt{\frac{m_2}{m_1 + m_2}} + \lambda_{p2} \sqrt{\frac{m_1}{m_1 + m_2}}; \quad \lambda_{pi} = 3D_{bi} / \left(\frac{8kT}{\pi m_{pi}} \right)^{1/2}.$$

Формула (1.39) представляет собой общее выражение для коэффициентов броуновской коагуляции.

В табл. 1.7 приведены значения пробегов λ_p и коэффициентов коагуляции K_{fm} , K_d и K_b для частиц с плотностью $\rho_p = 1$ г/см³ и размерами $r_1 = r_2 = r$ в воздухе при $T = 20^\circ\text{C}$ ($\rho_m = 1,23 \cdot 10^{-3}$ г/см³, $T = 293,15$ К, $\lambda_m = 0,07$ мкм). При $r \approx 0,01$ мкм скорость броуновской коагуляции имеет максимум, а при дальнейшем уменьшении r она убывает в соответствии с (1.38). Пробег при броуновском движении λ_p сравнивается с размером частиц при $r \approx 0,02$ мкм. Видно, что при $r < 0,01$ мкм определяющим процессом является броуновская коагуляция в свободномолекулярном режиме, а при $r > 0,1$ мкм — в диффузионном режиме.

Таблица 1.7. Пробег и коэффициенты броуновской коагуляции частиц в воздухе

r , мкм	λ_p , мкм	K_{fm} , см ³ /с	K_d , см ³ /с	K_b , см ³ /с
0,001	$8,314 \cdot 10^{-2}$	$8,813 \cdot 10^{-10}$	$6,909 \cdot 10^{-8}$	$8,728 \cdot 10^{-10}$
0,01	$2,750 \cdot 10^{-2}$	$2,787 \cdot 10^{-9}$	$7,227 \cdot 10^{-9}$	$2,112 \cdot 10^{-9}$
0,1	$1,383 \cdot 10^{-2}$	$8,813 \cdot 10^{-9}$	$1,149 \cdot 10^{-9}$	$1,042 \cdot 10^{-9}$
1	$2,454 \cdot 10^{-2}$	$2,787 \cdot 10^{-8}$	$6,449 \cdot 10^{-10}$	$6,336 \cdot 10^{-10}$
10	$7,196 \cdot 10^{-2}$	$8,813 \cdot 10^{-8}$	$5,980 \cdot 10^{-10}$	$5,949 \cdot 10^{-10}$
100	$2,258 \cdot 10^{-1}$	$2,787 \cdot 10^{-7}$	$5,933 \cdot 10^{-10}$	$5,923 \cdot 10^{-10}$

В дальнейшем для оценок броуновской коагуляции мы будем использовать следующие достаточно простые формулы:

$$K_b(r_1, r_2) = \sqrt{\frac{6kTr_1}{\rho_p} \left[1 + \left(\frac{r_1}{r_2} \right)^3 \right] \left(1 + \frac{r_2}{r_1} \right)^2}; \quad (1.40)$$

$$K_0(r) = K_b(r, r) = 8 \sqrt{\frac{3rkT}{\rho_p}}, \quad r < 0,01 \text{ мкм};$$

$$K_b(r_1, r_2) = \frac{2kT}{3\eta} \left(1 + \frac{r_1}{r_2}\right) \left(1 + \frac{r_2}{r_1}\right); \quad (1.41)$$

$$K_0(r) = K_b(r, r) = \frac{8kT}{3\eta}, \quad r > 0,1 \text{ мкм.}$$

В формуле (1.41) поправка Каннингема положена равной единице.

Приведем также оценки для градиентной коагуляции частиц, возникающей при ламинарном течении двухфазных смесей в трубах. Будем рассматривать пуазейлев режим течения, в котором профиль скорости имеет вид: $v(z) = v_0[1 - (z/R)^2]$, где z — расстояние от оси; R — радиус трубы; v_0 — скорость потока на оси. Градиент скорости в перпендикулярном направлении $\Gamma = |dzv| = 2zv_0/R^2$. Частицы, находящиеся на различных удалениях от оси z_1, z_2 , движутся с разными скоростями $v(z_1)$ и $v(z_2)$; если расстояние между ними $z_1 - z_2$ меньше, чем сумма радиусов, то частицы сливаются. Частота столкновений определяется умножением суммарного сечения частиц на их относительную скорость (эффектами обтекания мы пренебрегаем):

$$K_G(r_1, r_2) = \pi(r_1 + r_2)^2 |v_1 - v_2| \approx \frac{\pi(r_1 + r_2)^3 \Gamma}{2} = \frac{\pi z v_0 (r_1 + r_2)^3}{R^2}. \quad (1.42)$$

Таким образом, константа коагуляции для частиц, находящихся в потоке, равна $K_0(r) = K_G(r, r) = 8\pi z v_0 r^3 / R^2$. Подстановка в (1.36) приводит к следующему выражению для характерного времени коагуляции:

$$\tau_c = \frac{\rho_p R^2}{3z M v_0}. \quad (1.43)$$

Примечательно, что τ_c не зависит от размеров частиц и свойств несущей среды, а определяется только массовой концентрацией дисперсной фазы M , скоростью течения и геометрическими параметрами. С уменьшением радиуса канала влияние коагуляции увеличивается.

Перейдем к численным оценкам. Константа броуновской коагуляции (1.41) для частиц с $r > 0,1$ мкм не зависит от размеров и плотности частиц. В воздухе при $T = 20^\circ\text{C}$ ее значение $K_0 = 5,93 \cdot 10^{-10} \text{ см}^3/\text{с}$. Следовательно, характерное время коагуляции $\tau_c \approx 3,4 \cdot 10^9 / N$ (здесь N выражено в $1/\text{см}^3$, а τ_c — в секундах). Видно, что броуновская коагуляция атмосферных аэрозолей для частиц с размерами $r > 0,1$ мкм и концентрациями $N = 10^2 - 10^5 \text{ 1/см}^3$ идет с характерными временами от нескольких часов до нескольких месяцев. Этот процесс играет роль при длительном континентальном и глобальном переносе аэрозолей. Для концентрированных выбросов, содержащих субмикронные аэрозоли, ситуация качественно меняется. Например, для выброса частиц дыма с плотностью $\rho_p = 1 \text{ г/см}^3$, имеющего массовую концентрацию $M = 10^{-6} \text{ г/см}^3$ (эта величина на два порядка меньше характерных концентраций в табл. 1.2), формулы (1.36), (1.40) дают $\tau_c = 14,1 \text{ с}$ для

$r = 0,1$ мкм и $\tau_c = 3 \cdot 10^{-3}$ с для $r = 0,01$ мкм. Видно, что в концентрированных облаках или запыленных помещениях субмикронные частицы очень быстро меняют свои размеры за счет броуновской коагуляции.

Для оценки влияния градиентной коагуляции рассмотрим течение в батарее Синклера с параметрами: $v_0 = 2,77$ см/с, $R = 0,0115$ см, $L = 3,5$ см, $t_L = L/v_0 = 1,3$ с (см. разд. 1.4). Аэрозольные частицы с плотностью $\rho_p = 1$ г/см³ и массовой концентрацией $M = 1$ г/м³ имеют характерное время коагуляции $\tau_c = 8,3 \cdot 10^3$ с, что намного больше времени t_L , следовательно, изменение спектров частиц за счет градиентной коагуляции в батарее Синклера не происходит. Проведем также расчеты для течения смеси воздуха и капель воды со скоростью $v_0 = 20$ см/с в трубе радиусом $R = 1$ см и длиной $L = 200$ см. Из (1.22) легко получить, что пуазейлев режим течения реализуется на небольшом расстоянии $x \approx 2,5$ см от начала трубы, а переход течения при $x = L$ в турбулентный режим не наступает. Капли, находящиеся в потоке на расстоянии $z = 0,95$ см от оси трубы, имеют скорость $v(z) = 1,95$ см/с и проводят в трубе время $t_L = 103$ с. При массовой концентрации капель в потоке $M = 10^{-4}$ г/см³ характерное время, найденное по формуле (1.43), $\tau_c = 175$ с, т. е. для данной длины трубы $L = 200$ см укрупнение частиц за счет градиентной коагуляции играет роль. Данная оценка для τ_c справедлива и для течения смеси твердых частиц с жидкостью, причем ламинарный режим течения реализуется при этом вплоть до значений $L \sim 10^4 - 10^5$ см. Для таких L время пребывания частиц в потоке возрастает до $t_L \sim 10^4 - 10^5$ с и градиентная коагуляция будет сказываться очень сильно. Отметим, что приведенные рассуждения не учитывали другие механизмы коагуляции и процессы осаждения частиц на стенки. В реальности для размеров частиц $r < 0,1$ мкм наибольший вклад даст броуновская коагуляция, а для $r > 1$ мкм сильно скажутся гравитационная коагуляция и процесс осаждения частиц на стенки.

В заключение подчеркнем, что коагуляция резко зависит от концентрации аэрозольных частиц и требует для своего описания разработки более сложных теоретических моделей по сравнению с другими ранее рассмотренными процессами. Более строгое и подробное рассмотрение моделей кинетики коагуляции будет выполнено в гл. 3.

1.7. Диффузия и перенос аэрозолей в атмосфере

Рассмотрим перенос и рассеивание в атмосфере облака невзаимодействующих аэрозольных частиц (пассивной примеси), которое меняет свой дисперсный состав только за счет гравитационного выпадения крупных частиц. Речь может идти, например, о распространении в атмосфере частиц, возникших при вулканических извержениях, взрывах, пожарах, выбросах из дымовых труб и т. д. Основными процессами

в этом случае являются: перенос облака направленными воздушными потоками; размытие облака атмосферной турбулентной диффузией; осаждение аэрозолей из облака за счет гравитации и взаимодействие частиц с подстилающей поверхностью. Именно эти процессы определяют загрязнение приземного слоя воздуха и подстилающей поверхности аэрозольными частицами.

Формулировка основных уравнений. Существует два подхода к проблеме описания переноса примеси в направленных потоках и в атмосферных турбулентных пульсациях (Метеорология и атомная энергия, 1971; Монин, Яглом, 1965). Первый, обычно называемый лагранжевым или тейлоровским, использует блуждание частиц примеси в поле скоростей со случайной составляющей $\mathbf{v}'$, обусловленной турбулентностью (Метеорология и атомная энергия, 1971). Физически этот подход очень нагляден, позволяет учесть пространственно-временные корреляции поля $\mathbf{v}'$ и эффекты неполного увлечения частиц средой. Однако он очень трудоемок для численных расчетов и не позволяет провести оценки на уровне простых формул. К тому же само поле $\mathbf{v}'$ заранее не известно и его не удастся определить из каких-либо замкнутых уравнений. Второй подход (эйлеров или K -теория) использует полуэмпирическое уравнение атмосферной турбулентной диффузии (Монин, Яглом, 1965):

$$\partial_t n + \operatorname{div}(\mathbf{V}n) = \frac{\partial}{\partial x_i} K_{ij} \frac{\partial n}{\partial x_j} \quad (1.44)$$

для частиц определенного размера r . Здесь $n(r, \mathbf{x}, t)$ — концентрация частиц; $\mathbf{V} = \mathbf{v} + \mathbf{v}_a + \mathbf{u}_g$ — суммарная скорость переноса частиц; $\mathbf{v}$, $\mathbf{v}_a$ — скорости ветра и подъема облака; $\mathbf{u}_g(r)$ — скорость седиментации; $K_{ij} \sim \langle v'_i v'_j \rangle$ — тензор турбулентной диффузии. Недочеты этого подхода очевидны: пренебрежение инерционными и коллективными эффектами в движении частиц, использование величин K_{ij} , не поддающихся прямому измерению. Однако для численных оценок уравнение (1.44) вполне пригодно и наиболее часто применяется в отечественной литературе. По физическому смыслу величины K_{ij} должны определяться произведением характерного масштаба вихрей на пульсационную составляющую скорости. С увеличением размеров облака все более крупномасштабные движения атмосферы переходят в разряд вихрей и величины K_{ij} должны расти (эффект Ричардсона). Для распространения облака в приземном слое диагональные компоненты $K_{ij} \sim 5\text{--}50 \text{ м}^2/\text{с}$ (Хргиан, 1986).

Будем считать поверхность раздела плоской, т. е. $x_3 = 0$: скорость ветра $\mathbf{v}$ — направленной по оси x_1 , а тензор K_{ij} — диагональным в выбранной системе координат ($K_{ij} = K_i \delta_{ij}$). Ось x_3 направим вверх. Иногда, для краткости, будем использовать обозначения $x_3 = z$, $x_1 = x$.

Дальнейшие оценки в этом разделе будут проводиться для постоянных V , K_i . В этих предположениях

$$\partial_t n + V_x \partial_x n + V_z \partial_z n = K_i \frac{\partial^2 n}{\partial x_i^2}; \quad (1.45)$$

$$V_x = v_1 = v; \quad V_z = v_a - u_g; \quad z \geq 0.$$

В качестве начальных условий возьмем точечный мгновенный источник, расположенный на высоте H :

$$n_0(\mathbf{x}) = Q \delta(x_1) \delta(x_2) \delta(z - H). \quad (1.46)$$

Для формулировки граничных условий определим поток частиц по оси z : $j(\mathbf{x}, t) = K_z \partial_z n - V_z n$. На подстилающей поверхности

$$j(x_1, x_2, 0, t) = \alpha n(x_1, x_2, 0, t), \quad (1.47)$$

где величина α имеет размерность скорости и характеризует степень поглощения частиц поверхностью (для абсолютного отражения $\alpha = 0$).

Общее решение уравнения (1.45) с начальными и граничными условиями (1.46), (1.47) можно записать в факторизованном виде

$$n(\mathbf{x}, t) = \tilde{n}(z, t) \frac{Q}{4\pi t \sqrt{K_1 K_2}} \exp \left[-\frac{(x_1 - vt)^2}{4K_1 t} - \frac{x_2^2}{4K_2 t} \right], \quad (1.48)$$

где функция $\tilde{n}$ удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{n} + V_z \partial_z \tilde{n} &= K_z \frac{\partial^2 \tilde{n}}{\partial z^2}; \quad \tilde{n}|_{t=0} = \delta(z - H); \\ K_z \partial_z \tilde{n} &= (\alpha + V_z) \tilde{n}|_{z=0}. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Тем самым задача сводится к решению одномерного уравнения диффузии на полуоси $z \geq 0$ с соответствующими начальными и граничными условиями.

Видимость аэрозольного облака в атмосфере. Рассмотрим случай, когда диффузия изотропна $K_i = K$, а времена после залпового выброса аэрозольных частиц Q на высоте H достаточно малы, чтобы можно было пренебречь взаимодействием облака с подстилающей поверхностью и осадждением на нее частиц из облака ($t < \min\{H^2/4K; H/u_g\}$). Ясно, что

$$n(\mathbf{x}, t) = \frac{Q}{(4\pi K t)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(x_1 - vt)^2 + x_2^2 + (z - H)^2}{4K t} \right]. \quad (1.50)$$

Остановимся на вопросе о видимости облака (Тихонов, Самарский, 1966), например, применительно к картине взрыва снаряда на

высоте H . Если I_0 — интенсивность света в чистой атмосфере, то после прохождения слоя аэрозолей с переменной концентрацией $n(\mathbf{x}, t)$ интенсивность ослабится до величины $I = I_0 \exp \left(- \sigma \int n ds \right)$, где интегрирование ведется по лучу, проходящему через облако, а величина σ — среднее по спектру частиц сечение поглощения света. Если наблюдатель находится на большом расстоянии от облака $x_1 \gg H$, то визуально оно проектируется на плоскость x_2, z . Интегрируя по лучу $-\infty < x_1 < \infty$, получаем

$$\tau \equiv \sigma \int n ds = \sigma \int_{-\infty}^{\infty} n dx = \frac{\sigma Q}{4\pi K t} \exp \left[- \frac{x_2^2 + (z - H)^2}{4Kt} \right]. \quad (1.51)$$

Визуальная картина развития облака определяется порогом контрастности δ : при $(I_0 - I)/I_0 < \delta$ соответствующая часть облака становится невидимой, а при $(I_0 - I)/I_0 > (1 - \delta)$ объем кажется совершенно непрозрачным. Займемся поведением границы, за которой облако исчезает из поля зрения, т. е. $I/I_0 = 1 - \delta$. Считая оптическую толщину небольшой ($I/I_0 \approx 1 - \tau$), получаем уравнение для поведения видимого радиуса облака $\rho = \sqrt{x_2^2 + (z - H)^2}$:

$$\delta = \tau = \frac{\sigma Q}{4\pi K t} \exp \left[- \frac{\rho^2}{4Kt} \right]. \quad (1.52)$$

При малых t радиус облака увеличивается и достигает максимальной величины $\rho_m = (\sigma Q / e\pi\delta)^{1/2}$ в момент времени $t_m = \sigma Q / 4\pi\delta eK$. При $t > t_m$ радиус облака уменьшается, и в момент $t_r = et_m$ оно полностью исчезает из-за малой контрастности.

Наблюдения за видимыми размерами облака помогают определить параметры атмосферы во время проведения конкретных опытов. Так, например, время исчезновения облака из поля видимости t_r связано со средними коэффициентами диффузии $\overline{K}$ и средним радиусом аэрозольных частиц $\overline{r}$:

$$t_r = \frac{3M}{16\pi\rho_p\overline{r}\delta\overline{K}}, \quad (1.53)$$

где M — масса всех частиц в аэрозольном выбросе; ρ_p — их плотность, а $\delta \approx 0,01-0,02$ — порог контрастности.

Одним из способов отбора проб из облака взрыва в диффузионных экспериментах (см. рис. 1.6 и главы 9, 10), который позволяет исследовать состав аэрозольных продуктов взрыва (АПВ), является забор проб самолетом-лабораторией.

Проведенные выше оценки помогают определить эффективность такого процесса отбора проб. Отметим, что сама методология отбора

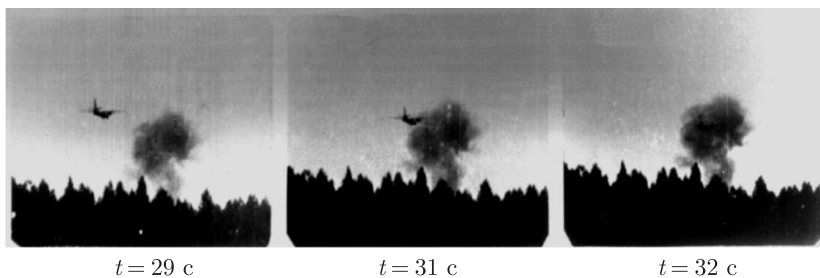


Рис. 1.6. Отбор проб из облака взрыва самолетом-лабораторией

проб с помощью самолета-лаборатории предусматривает отбор лишь небольшой части АПВ из облака взрыва на различных стадиях его развития. Количество аэрозолей, отбираемых при пролете через облако взрыва, зависит от площади S входного окна самолетной фильтровальной установки (СФУ) (для СФУ самолета АН-24 РР, например, $S = 0,045 \text{ м}^2$) и реальных размеров облака, которые, в свою очередь, зависят от неоднородного по высоте ветрового сноса и размытия облака за счет атмосферной турбулентности на момент пробоотбора. Наиболее просто коэффициент пробоотбора k_c (отношение массы АПВ, отобранной СФУ, к полной массе АПВ в облаке взрыва) определяется при пролете через центр облака взрыва на небольшие времена — порядка 1 мин:

$$k_c(t) = \frac{S}{4\pi K t},$$

где t — время от начала взрыва до момента пробоотбора.

Оценки загрязнения подстилающей поверхности и приземного слоя воздуха. Оценим теперь параметры загрязнения приземного слоя для точечного мгновенного источника (1.46). Поскольку решение с источником (1.46) представляет собой функцию Грина уравнения (1.45), то с его помощью можно определить необходимые величины и для любого протяженного во времени и в пространстве источника. Кроме того, такое решение имеет и непосредственный смысл для импульсного выброса с относительно небольшими начальными размерами $R_0 \ll H$. Будем считать, что подъем облака закончен ($v_a = 0$) и оно стабилизировалось на высоте H . Для невесомой примеси ($u_g = 0$) функцию $\hat{n}$, определяемую (1.49), легко найти, помещая фиктивный источник в точку $(0, 0, -H)$:

$$\hat{n}(z, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi K t}} \left\{ \exp \left[-\frac{(z - H)^2}{4K_z t} \right] \pm \exp \left[-\frac{(z + H)^2}{4K_z t} \right] \right\}, \quad (1.54)$$

где знак плюс относится к абсолютному отражению ($K_z \partial_z \hat{n}|_{z=0} = 0$), а знак минус — к абсолютному поглощению ($\hat{n}|_{z=0} = 0$) на подстилающей поверхности.

Определим загрязнение поверхности, считая ее абсолютно поглощающей. Поток к поверхности определяется в этом случае по формуле

$$j(x_1, x_2, t) = K_z \partial_z n|_{z=0}. \quad (1.55)$$

Считая диффузию изотропной и вводя безразмерные координаты $\mathbf{u} = \mathbf{x}/H$, время $\tau = tv/H$ и параметр $\beta = K/vH$, получаем

$$j(x_1, x_2, t) = \frac{Q}{(4\pi\beta\tau)^{3/2}H^2t} \exp \left[-\frac{(u_1 - \tau)^2 + u_2^2 + 1}{4\beta\tau} \right]. \quad (1.56)$$

Интегральная по времени плотность выпадений $S(x_1, x_2) = \int_0^\infty j(x_1, x_2, t) dt$ находится по формуле

$$S(x_1, x_2) = \frac{Q\Psi(u_1, u_2)}{4\pi H^2}, \quad \Psi(u_1, u_2) = \frac{(1+2\beta/\rho)}{\beta\rho^2} \exp \left(\frac{u_1 - \rho}{2\beta} \right), \quad (1.57)$$

где $\rho = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 + 1}$, а функция ψ сама безразмерна и зависит только от безразмерных величин, что делает формулу (1.57) удобной для оценок с различными значениями v , H , K . Плотность выпадений максимальна на оси следа $x_2 = 0$ и достигается в точке $x_{1\max} = Hu_m$, где значение u_m определяется из трансцендентного уравнения

$$\frac{4p(1+3p)}{(1+2p)} = \sqrt{\frac{1+u_m^2}{u_m^2}} - 1; \quad p = \frac{\beta}{\sqrt{1+u_m^2}}. \quad (1.58)$$

На больших расстояниях $u_1 \gg 1$ плотность выпадений на оси следа убывает довольно медленно:

$$S(x_1, 0) \approx \frac{Q}{(4\pi\beta x_1^2)}. \quad (1.59)$$

Формула (1.54) для отражающей поверхности удобна для завышающей оценки концентрации аэрозолей в приземном слое воздуха ($z = 0$):

$$N(x_1, x_2, t) = \frac{2Q}{(4\pi\beta\tau)^{3/2}H^3} \exp \left[-\frac{(u_1 - \tau)^2 + u_2^2 + 1}{4\beta\tau} \right]. \quad (1.60)$$

Если считать среднюю скорость дыхания R постоянной, то можно определить интегральное за время прохождения облака поступление аэрозолей в организм m :

$$m(x_1, x_2) = R \int_0^\infty N(x_1, x_2, t) dt = \frac{RQ}{2\pi v\beta\rho H^2} \exp \left(\frac{u_1 - \rho}{2\beta} \right). \quad (1.61)$$

В конечном счете формулы (1.57), (1.60) позволяют оценить реальную степень опасности залпового выброса с точки загрязнения местности и приземного слоя воздуха.

При распространении облака на большие расстояния существенным становится гравитационное осаждение частиц (седиментация). Поток частиц на абсолютно поглощающую поверхность с учетом седиментации имеет вид (Прессман, 1959)

$$K_z \partial_z n|_{z=0} = \frac{H}{t(4\pi K_z t)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(H - u_g t)^2}{4K_z t} \right], \quad (1.62)$$

где u_g — скорость осаждения. Вводя дополнительную безразмерную переменную $\gamma = u_g/v$ и учитывая (1.48), получаем для изотропной диффузии

$$S(x_1, x_2) = \frac{Q\Phi(u_1, u_2)}{4\pi H^2}, \quad (1.63)$$

$$\Phi(u_1, u_2) = \frac{\eta(1 + 2\beta/\rho\eta)}{\beta\rho^2} \exp \left(\frac{u_1 + \gamma - \rho\eta}{2\beta} \right),$$

где $\eta = \sqrt{1 + \gamma^2}$. Сравнивая (1.63) с (1.57), видим, что седиментация становится существенной при $\gamma|1 - \gamma\rho/2|/2\beta \approx 1$. На малых расстояниях за счет осаждения плотность выпадений увеличивается, а на больших — уменьшается, как это и должно быть по физическому смыслу. Качественным отличием от (1.57) является то, что на оси следа S убывает при $u_1 \gg 1$ экспоненциально, т.е. гораздо быстрее, чем по (1.57). Происходит это при $u_1 \geq 4\beta/\gamma^2$. Данная оценка полезна для определения расстояний, на которых гравитационное выпадение сильно меняет картину выпадений и интегральный баланс.

Очень наглядной является кинематическая модель выпадения частиц из облака, когда диффузия по оси z слабо сказывается, т.е. $K_z \rightarrow 0$. Для простоты будем считать, что в горизонтальной плоскости она изотропна: $K_1 = K_2 = K$. Проводя предельный переход в (1.62), получаем

$$K_z \partial_z n|_{z=0} \xrightarrow{K_z \rightarrow 0} \frac{H}{t} \delta(H - wt). \quad (1.64)$$

Интегрирование по времени с учетом (1.48) дает

$$S(x_1, x_2) = \frac{Q\Phi(u_1, u_2)}{4\pi H^2}, \quad \Phi(u_1, u_2) = \frac{\gamma}{\beta} \exp \left\{ -\frac{\gamma[(u_1 - \gamma^{-1})^2 + u_2^2]}{4\beta} \right\}. \quad (1.65)$$

Максимальная плотность выпадений достигается на оси следа в точке $x_{1\max} = Hv/u_g$ и составляет величину $S_m = Qu_g/4\pi HK$. Процесс осаждения по вертикали является чисто кинематическим для достаточно крупных частиц, у которых скорость падения $u_g \gg 4K_z/H$.

Глава 2

КИНЕТИКА ЗАРОЖДЕНИЯ И РОСТА ЧАСТИЦ ДИСПЕРСНОЙ ФАЗЫ

При солнце льется ясный дождь,
Течет вода две-три минуты,
Крестьяне бегают разуты,
Потом опять сияет свет,
Дождь миновал, и капель нет.
Открой мне смысл картины этой.

Н. Заболоцкий. Поэма дождя

Флуктуационное зародышеобразование и дальнейший конденсационный рост частиц в пересыщенном паре являются одними из наиболее важных процессов, приводящих к зарождению и развитию дисперсной фазы. При наличии инородных частиц в основном происходит поглощение пара частицами примеси, как это имеет место, например, в облачных процессах с участием атмосферных ядер конденсации. При этом достаточно лишь создать состояние пересыщения. В чистом же пересыщенном паре начальное состояние метастабильно и процесс конденсации начинается только при появлении частиц, имеющих размер больше некоторого критического. Закритические частицы устойчивы и им термодинамически выгодно расти в дальнейшем. Возникают эти частицы благодаря флуктуационному зарождению комплексов молекул, причем с падением пересыщения значение критического размера растет и образование закритических комплексов все менее вероятно. Скорости флуктуационного зародышеобразования и конденсационного роста частиц определяются термодинамическими параметрами системы, поэтому в общем случае требуется совместное решение уравнения кинетики конденсации и уравнений, определяющих изменение термодинамических величин. В гл. 1 были приведены некоторые формулы, которые позволяют оценивать скорости конденсационных процессов для отдельных капель.

В данной главе сформулирован более строгий и последовательный подход, основывающийся на описании ансамбля частиц с учетом тепловыделения при конденсации и позволяющий производить аналитиче-

ское и численное моделирование реальных конденсационных процессов. В разд. 2.1 сформулированы различные варианты кинетического уравнения, позволяющие описывать процессы зарождения и конденсационного роста (испарения) ансамбля частиц в пересыщенном паре; в разд. 2.2 определены скорости основных физических процессов, определяющих поведение спектров частиц; в разд. 2.3 показано, как должно учитываться изменение термодинамических величин и выделение тепла при конденсации. В разд. 2.4 проанализированы способы решения кинетического уравнения с источником, использующие метод характеристик. В качестве иллюстрации получены аналитические решения для модельной задачи. В разд. 2.5 проведены некоторые оценки для начальной стадии зарождения и роста капель в водяном облаке. Раздел 2.6 посвящен исследованию процесса конденсации в асимптотической стадии (при $t \rightarrow \infty$). Для исследования асимптотических спектров привлечена гипотеза автомодельности нелинейных уравнений кинетики конденсации.

2.1. Формулировка кинетического уравнения для процесса конденсации

Пусть в паре с концентрацией n_v образовалась частица конденсата, состоящая из g молекул. Изменение свободной энергии при этом составит:

$$\Phi(r) = (\mu_p - \mu_v)g + 4\pi r^2 \sigma = 4\pi(\mu_p - \mu_v)r^3/3q + 4\pi r^2 \sigma, \quad (2.1)$$

где r — радиус капли; q — объем молекулы в жидкой фазе; σ — поверхностное натяжение; μ_p, μ_v — химические потенциалы в расчете на молекулу в составе частицы и в газовой фазе. В недосыщенном паре $\mu_p > \mu_v$, в насыщенном $\mu_p = \mu_v$, в пересыщенном $\mu_p < \mu_v$. Дифференцируя (2.1) по r , получаем значение критического размера r_* , для которого $\Phi(r)$ максимальна:

$$r_* = \frac{2\sigma q}{(\mu_v - \mu_p)}; \quad \Phi(r_*) = \frac{16\pi q^2 \sigma^3}{3(\mu_v - \mu_p)^2}. \quad (2.2)$$

Отсюда видно, что в пересыщенном паре для образования критических частиц существует некоторый энергетический барьер, причем образование частицы с $r > r_*$ требует меньшей энергии, чем образование критического зародыша. Из поведения $\Phi(r)$ следует, что частицы с $r < r_*$ должны испаряться, а с $r > r_*$ — расти.

Статистически равновесное распределение частиц по размерам n_g определяется по формуле

$$n_g = n_0(g) \exp \left[-\frac{\Phi(g)}{kT} \right], \quad (2.3)$$

где $n_0(g)$ — слабо меняющийся нормировочный множитель порядка n_v , а $\Phi(g)$ находится по формуле (2.1) (напомним, что $g = 4\pi r^3/3q$). Для пересыщенного пара функция n_g имеет минимум в окрестности $g = g_*$ и затем экспоненциально растет. Очевидно, что растущая часть кривой не может реализоваться и на самом деле процесс конденсационного формирования частиц носит динамический характер. Конечный итог очевиден — это отслоение избыточного количества пара $n_v - n_\infty$ в отдельную фазу (n_∞ — концентрация насыщенного пара над плоской поверхностью).

Получим уравнение кинетики зародышеобразования и конденсации в пересыщенном паре для пространственно однородных дисперсных систем (Зельдович, 1942; Френкель, 1975). Обозначим через f_g неравновесную функцию распределения, а через S_g — результирующее число зародышей, переходящих в единицу времени от размера $g-1$ к размеру g . Очевидно, что

$$\partial_t f_g = S_g - S_{g+1}; \quad f_1 + \sum_{g=2}^{\infty} g f_g = n_v. \quad (2.4)$$

Обозначим через β_g число молекул пара, поглощаемых в единицу времени каплей из g молекул, а через γ_g — испаряющихся с поверхности. Ясно, что $S_g = \beta_{g-1} f_{g-1} - \gamma_g f_g$. Для равновесной функции распределения n_g должен выполняться принцип детального равновесия $\beta_{g-1} n_{g-1} = \gamma_g n_g$, что позволяет выразить γ_g через коэффициенты β_g и равновесную функцию распределения:

$$\gamma_g = \frac{\beta_{g-1} n_{g-1}}{n_g}. \quad (2.5)$$

Следовательно, поток в пространстве размеров имеет вид

$$S_g = \beta_{g-1} \left(f_{g-1} - \frac{f_g n_{g-1}}{n_g} \right) \approx -\beta_g n_g \partial_g \left(\frac{f_g}{n_g} \right), \quad (2.6)$$

а уравнение (2.4) превращается в уравнение Фоккера–Планка:

$$\partial_t f_g = \partial_g \left[\beta_g n_g \partial_g \left(\frac{f_g}{n_g} \right) \right]. \quad (2.7)$$

Аналитическое и численное решение уравнения (2.7) представляет собой довольно сложную задачу, поэтому часто используют упрощенное кинетическое уравнение, получаемое из физических соображений и представляющее собой уравнение непрерывности в пространстве масс капель g (в частности в начале этого раздела масса g измерялась в числе молекул):

$$\partial_t f(g, t) + \partial_g [v(g, t) f(g, t)] = I(g, t), \quad (2.8)$$

где $f(g, t)$ — концентрация капель с массой g в системе в момент времени t (спектр частиц), $v(g, t) = d_t g$ — скорость конденсационного роста (испарения) капли с массой g , а $I(g, t)$ — интенсивность источника флуктуационного зародышеобразования. В дальнейшем для описания кинетики конденсации в свободных, пространственно однородных системах, объем которых изолирован от побочных процессов (расширения, теплообмена и т. п.), нами будет использоваться именно это уравнение.

При развитой конденсации, когда концентрация пара превышает насыщенную, средний размер капель и массовая концентрация в капельной фракции $M(t) = \int_0^{\infty} g f(g, t) dg$ растут со временем, а пересы-

щение — избыток концентрации пара по сравнению с концентрацией насыщенного пара — падает в соответствии с законом сохранения полной массовой концентрации конденсирующегося вещества при неизменном объеме системы. При этом счетная концентрация капель

$N(t) = \int_0^{\infty} f(g, t) dg$ обычно падает со временем. Процесс заканчивается

исчерпанием избытка пара, которое формально происходит за бесконечное время.

В реальных процессах скорость конденсации $v(g, t)$ и интенсивность источника $I(g, t)$ зависят от пересыщения (см. гл. 1). Так, например, при снижении пересыщения источник рождает все более крупные капли с массой вблизи некоторой критической $g_*(t)$ (значение $g_*(t)$ растет с падением пересыщения), а сама интенсивность резко падает из-за малой вероятности случайного образования крупных комплексов. Кроме того, по физическому смыслу величины $g_*(t)$ капли с массой $g = g_*(t)$ находятся в неустойчивом равновесии и имеют нулевую скорость конденсации $v(g_*, t) = 0$; при этом докритические капли с $g < g_*(t)$ испаряются ($v < 0$), а закритические — с $g > g_*(t)$ — растут ($v > 0$). Тем самым основные величины v и I , входящие в (2.8), существенно зависят от поведения интегральной величины $M(t)$, определяемой самим решением задачи f , т. е. уравнение (2.8) по сути является нелинейным. Это обстоятельство должно учитываться при решении задачи путем добавления к уравнению (2.8) связи между $g_*(t)$ и $M(t)$ и использования явных зависимостей v и I от $g_*(t)$. Подобного рода проблема возникает и при учете зависимостей скоростей v и I от температуры. Она решается путем учета баланса тепла при конденсации.

Основные закономерности поведения счетной $N(t)$ и массовой $M(t)$ концентраций можно получить непосредственно из уравнения (2.8). Для этого умножим последовательно (2.8) на 1 и g и проинтегрируем по g от 0 до ∞ . Интегрируя слагаемые, содержащие производную по g , по частям, а также пользуясь достаточно быстрым убыванием спектра

f при $g \rightarrow \infty$ и его конечностью при $g = 0$, получаем

$$d_t N = \int_0^{\infty} I(g, t) dg + v(0, t) f(0, t); \quad (2.9)$$

$$d_t M = \int_0^{\infty} g I(g, t) dg + \int_0^{\infty} v(g, t) f(g, t) dg. \quad (2.10)$$

Физический смысл членов в уравнениях (2.9), (2.10) довольно нагляден: первые слагаемые в правых частях обусловлены действием источника; второе слагаемое в правой части (2.9) описывает убыль числа капель за счет их полного испарения, поскольку скорость $v(0, t)$ отрицательна; второе слагаемое в правой части (2.10) описывает интегральное по спектру изменение массовой концентрации капель за счет массообмена между паром и каплями. Обычно масса критической капли $g_*(t)$ явно выражается через концентрацию пара $n_v(t)$, поэтому для определения $g_*(t)$ достаточно воспользоваться условием $n_v(t) + M(t) = \text{const}$, а уравнение (2.8) и интегральное соотношение (2.10) автоматически обеспечивают правильное распределение конденсирующегося вещества между паром и каплями.

2.2. Скорости зародышеобразования и конденсационного роста

Для определения интенсивности источника $I(g, t)$ в (2.8) рассмотрим стационарное решение уравнения (2.7), когда поток $S_g = S = \text{const}$ (Зельдович, 1942). Будем предполагать, что при малых g $f_g = n_g$, а при $g \rightarrow \infty$ $f_g/n_g \rightarrow 0$. Для постоянного потока S

$$\partial_g \left(\frac{f_g}{n_g} \right) = -\frac{S}{\beta_g n_g}; \quad \frac{f_g}{n_g} = S \int_g^{\infty} \frac{dg}{\beta_g n_g}. \quad (2.11)$$

Поскольку $f_g \rightarrow n_g$ при $g \rightarrow 0$, находим выражение для стационарного потока:

$$S = \left(\int_0^{\infty} \frac{dg}{\beta_g n_g} \right)^{-1}. \quad (2.12)$$

Подынтегральное выражение имеет в окрестности $g = g_*(t)$ резкий максимум. Пользуясь методом перевала, получаем

$$S = \frac{q \beta_{g_*} n_{g_*}}{2\pi r_*^2} \sqrt{\frac{\sigma}{kT}}. \quad (2.13)$$

Формула (2.13) дает скорость рождения числа жизнеспособных зародышей. По физическому смыслу они имеют размер порядка критического. Будем считать, что весь процесс флуктуационного зародышеобразования сводится к наличию источника частиц, имеющих один и тот же размер $\tilde{g}$ вблизи критического (гомогенная нуклеация), т. е.

$$I(g, t) = J(t) \delta[g - \tilde{g}(t)];$$

$$J(t) \equiv S = \frac{q\beta_{g_*} n_v}{2\pi r_*^2} \sqrt{\frac{\sigma}{kT}} \exp \left[-\frac{\Phi(g_*)}{kT} \right]. \quad (2.14)$$

В соответствии с (2.8) получаем следующее уравнение для кинетики конденсации с учетом гомогенной нуклеации:

$$\partial_t f(g, t) + \partial_g [v(g, t) f(g, t)] = J(t) \delta[g - \tilde{g}(t)]. \quad (2.15)$$

Займемся выяснением физического смысла и определением конкретных зависимостей для отдельных слагаемых этого уравнения.

Из определения величин β_g , γ_g следует, что скорость роста капли $v(g) = \beta_g - \gamma_g$, т. е. $v(g) = (\beta_g - \beta_{g-1} n_{g-1}/n_g)$. Поскольку β_g слабо зависит от размеров частиц по сравнению с отношением n_{g-1}/n_g , то $v(g)$ обращается в нуль при $g = g_*$. При $g < g_*$ $v(g) < 0$, а при $g > g_*$ $v(g) > 0$ в соответствии с общими закономерностями испарения и роста отдельных капель.

В дальнейшем необходимо конкретное выражение для критического размера r_* , g_* в зависимости от термодинамических параметров среды. Согласно (2.2) для этого нужно найти разность $(\mu_v - \mu_p)$, которая обычно определяется через пересыщение S :

$$(\mu_v - \mu_p) = kT \ln S; \quad S = \frac{p_v}{P_s}; \quad r_* = \frac{2\sigma q}{kT \ln S}; \quad g_* = \frac{4\pi r_*^3}{3q}, \quad (2.16)$$

где $P_s = P_s(T)$ — давление насыщенного пара при заданной температуре.

Определим зависимости J , β_g , $v(g)$ для случая, когда поглощение пара каплями происходит в свободномолекулярном режиме, т. е. размер зародышей и выросших капель мал по сравнению с пробегом молекул пара в среде. В этом случае скорость поглощения пара определяется газокинетическим потоком молекул

$$\beta_g = \alpha \pi r^2 n_v v_{vT}; \quad v_{vT} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_v}}, \quad (2.17)$$

где α — коэффициент аккомодации (доля молекул пара, прилипающих при столкновении к поверхности капли); v_{vT} — средняя тепловая скорость молекул пара. Подставляя (2.16), (2.17) в (2.14), получаем

выражение для интенсивности зародышеобразования J , совпадающее с (1.28) из гл. 1 (Зельдович, 1942; Френкель, 1975):

$$J = \alpha q n_v^2 \frac{v_{vT}}{2} \sqrt{\frac{\sigma}{kT}} \exp\left(-\frac{4\pi\sigma r_*^2}{3kT}\right) = \alpha n_v^2 q \sqrt{\frac{2\sigma}{\pi m_v}} \exp\left(-\frac{g_* \ln S}{2}\right). \quad (2.18)$$

Определение основных величин в кинетическом уравнении (2.15) завершается нахождением функции $v(g) = (\beta_g - \beta_{g-1} n_{g-1}/n_g)$. Пренебрежем в этом выражении отличием β_g от β_{g-1} и слагаемым $(g-1)^{2/3} - g^{2/3}$ по сравнению с $(\mu_v - \mu_p)$ (экспоненциальный член в отношении n_{g-1}/n_g), а также используем формулу (2.17) для β_g , что приведет к следующей зависимости для скорости роста отдельного зародышеобразующего зародыша в свободномолекулярном режиме:

$$v(g) = \alpha \pi r^2 n_v v_{vT} (S - 1)/S. \quad (2.19)$$

Как и полагается, капли растут при $S > 1$ и испаряются при $S < 1$. Однако факт испарения докритических капель в (2.19) потерян по самому смыслу вывода этой формулы. Для корректного применения формулы (2.19) необходимо, чтобы скорость конденсационного роста капель была больше, чем скорость роста самого критического размера, определяемая производной $d_t g_*$. Как показывают расчеты, на первой стадии зарождения дисперсной фазы это предположение обычно выполняется.

Представляет интерес другой предельный случай конденсационного роста и испарения капель, когда пересыщение пара очень мало, а характерные размеры капель велики по сравнению с пробегом молекул пара в среде. При этом флуктуационное зародышеобразование подавлено, поскольку критический размер макроскопически велик, а подвод пара к каплям носит диффузионный характер. Процесс исчерпывания пара происходит довольно своеобразно: критический размер растет вместе с уменьшением концентрации пара, закритические капли также растут, но происходит некоторое пополнение газовой фазы за счет испарения докритических капель (Лифшиц, Слезов, 1958). Кратко эту асимптотическую стадию иногда называют переконденсацией (Куни, 1988). В кинетическом уравнении (2.15) достаточно в этом случае определить зависимость $v(g)$, поскольку слагаемое с источником отсутствует. Рассмотрим стационарную картину процесса диффузии пара, когда диффузионный поток постоянен. Пусть D_v — коэффициент диффузии пара в среде, r — радиус капли, R — расстояние от центра капли до некоторой точки. Тогда поток числа молекул по направлению к капле

$$I = 4\pi D_v R^2 d_R n = \text{const}; \quad n(R) = n_v + (n_r - n_v)r/R, \quad (2.20)$$

где n_v — средняя концентрация пара в системе; n_r — концентрация пара у поверхности капли. В стационарном режиме n_r равна концен-

трации насыщенного пара у поверхности капли радиусом r , которая связана с концентрацией насыщенного пара над плоской поверхностью n_∞ следующим образом: $n_r = n_\infty \exp\left(\frac{2\sigma q}{rkT}\right) \approx n_\infty\left(1 + \frac{2\sigma q}{rkT}\right)$. Подставляя в (2.20) и используя выражение (2.16) для критического размера, получаем

$$v(g) = I = 4\pi D_v(n_v - n_\infty)(r - r_*) = \chi \left[\left(\frac{g}{g_*} \right)^{1/3} - 1 \right], \quad (2.21)$$

где $\chi = 8\pi\sigma q D_v n_\infty / kT$. Как и полагается, докритические частицы испаряются, а закритические растут.

Скорости роста и испарения частицы в произвольном режиме обмена пара с каплей находятся по интерполяционной формуле

$$v(r) = \frac{\alpha\pi r^2 n_v v_v T}{(1 + 3r\alpha/4\lambda_v)} \left\{ 1 - \exp \left[\left(\frac{r_*}{r} - 1 \right) \ln S \right] \right\}, \quad (2.22)$$

где λ_v — длина пробега молекул пара в среде. Массовая скорость роста находится из (2.22) заменой $n_v \rightarrow \rho_v$ (здесь ρ_v — плотность пара). В пределе больших $r \gg \lambda_v$ формула (2.22) дает скорость роста частиц в диффузионном режиме (2.21), а при $r \ll \lambda_v$, $r \gg r_*$ — скорость роста закритических зародышей в свободномолекулярном режиме (2.19). Следует отметить, что формула (2.22) правильно описывает и процесс испарения частиц в недосыщенном паре, если считать критический размер r_* отрицательным.

В расчетах процесса гомогенного зародышеобразования, использующих кинетическое уравнение (2.15), необходимо задавать инжекцию частиц, размер которых несколько превышает критический: $\tilde{g} > g_*$ (см. разд. 2.5). Существующая при этом неопределенность в значении параметра $\tilde{g}$ обусловлена заменой реального уравнения кинетики конденсации (2.7), имеющего диффузионный вид в пространстве размеров, на упрощенное уравнение неразрывности (2.15) с источником частиц закритического размера. Оценить размеры возникающих частиц можно из условия, что скорость диффузионного расплывания пакета в окрестности критического размера сравнивается со скоростью конденсационного роста частиц. Исходя из этих соображений, Е. А. Гончаровым получено следующее выражение для характерной массы частиц $\tilde{g}$, рождаемых источником (Δg выражено в числе молекул):

$$\tilde{g} = g_* + \Delta g; \quad \Delta g = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{4\pi}{3q} \right)^{1/3} \left(\frac{kT}{\sigma} \right)^{1/2}. \quad (2.23)$$

Расчеты показывают, что значение Δg мало влияет на результаты и можно, например, задавать $\tilde{g} = 1,1-2,0g_*$. Различие в динамике образования и роста частиц при этом оказывается несущественным.

2.3. Поведение термодинамических величин с учетом процесса конденсации

Обратимся к реальным процессам, на фоне которых происходят процессы конденсации. Одним из важных классов задач такого рода является конденсация пара при адиабатической разгрузке: охлаждение воздуха и конденсация содержащегося в нем водяного пара при подъеме паровоздушного облака в атмосфере; конденсация пара в камере Вильсона при увеличении объема камеры; адиабатический разлет и конденсация паров вещества после нагружения интенсивной ударной волной.

Для определенности обратимся к последней задаче. Фазовое состояние вещества после ударного нагружения удобно классифицировать, пользуясь энтропийным критерием (Зельдович, Райзер, 1966). Для этого в плоскости «давление–удельный объем» определим положение точки P_0 , V_0 после ударного нагружения относительно критической адиабаты S_c . Если точка P_0 , V_0 лежит левее S_c , то вещество при разгрузке будет заходить на кривую равновесия фаз со стороны жидкости, т. е. в дальнейшем будет образовываться перегретая вскипающая жидкость, а если эта точка лежит правее S_c , то будет образовываться пересыщенный конденсирующийся пар. Нас будет интересовать последний случай.

Дальнейший ход процесса (Райзер, 1959; Зельдович, Райзер, 1966) после пересечения в момент времени t_1 кривой насыщенного пара (НП) схематически изображен на рис. 2.1, где реальная кривая проведена пунктиром. Сначала из-за отсутствия центров конденсации пар разгружается по адиабате Пуассона пара (АПП) и пересыщение S растет. Затем начинается интенсивное рождение капель и их конденсация. Выделяющееся при этом тепло сбивает рост пересыщения и реальная кривая приближается к равновесной двухфазной адиабате (РДА). На поздней стадии разлета пар становится очень разреженным и его конденсация практически прекращается (наступает «закалка»). Остатки пара разлетаются при $t > t_2$ по адиабате Пуассона. Рост пересыщения после момента «закалки» t_2 слабо влияет на кинетику зародышеобразования, поскольку вблизи t_2 величины $n_v(t)$ и $S(t) - 1$, а следовательно, и $J(t)$ малы; а для больших S при $t > t_2$ образующиеся зародыши имеют слишком малый размер по сравнению с появившимися ранее и уже сильно выросшими каплями.

Упрощенная модель образования и роста частиц новой фазы была предложена в работе (Райзер, 1959) применительно к задаче о конденсации паров, возникших при интенсивном ударе метеорита о лунную поверхность. В дальнейшем ее существенные моменты были использованы в работе (Киффер, 1986), где рассмотрено формирование конденсирующейся фазы при вулканических извержениях на спутнике Юпитера Ио. Согласно этой модели процесс разбивается на две ста-

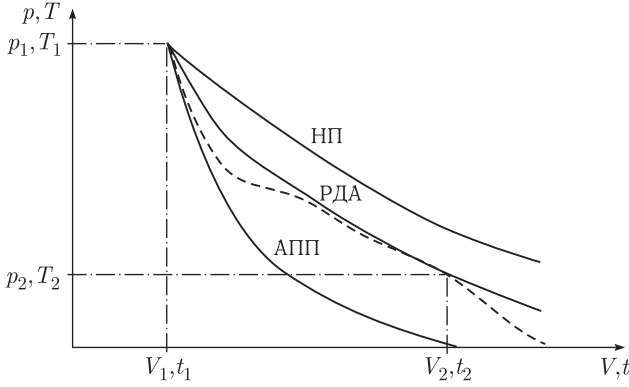


Рис. 2.1. Поведение термодинамических величин после пересечения кривой насыщенного пара

дии: эффективное рождение зародышей вблизи точки, где реализуется максимальное переохлаждение; дальнейший рост сформировавшихся зародышей при постоянном числе центров конденсации ($N = \text{const}$) с учетом «закалки». Оценки с применением данной модели не обладают большой точностью, но их можно использовать для качественного описания процесса и представления о порядках характерных величин.

Сформулируем уравнение, описывающее поведение термодинамических величин в общем случае. Будем считать, что газовая среда и капли имеют одинаковую температуру, т. е. выделяемое при конденсации тепло достаточно быстро распределяется по объему, а окружающую капли среду будем считать состоящей из паров данного вещества и газообразной среды-носителя (например, воздуха). Обозначим через M_v , M_p — массы паров и частиц (капель) в объеме V , а через C_{vv} , C_{vp} — соответствующие удельные теплоемкости при фиксированном объеме. Аналогичные величины для среды-носителя обозначим через M_m , C_{vm} . Учитывая, что $dE + pdV = dQ = LdM_p$, а $dM_v = -dM_p$, получаем

$$(M_m C_{vm} + M_v C_{vv} + M_p C_{vp}) dT + (C_{vp} - C_{vv}) T dM_p + \left(\frac{M_v}{A_v} + \frac{M_m}{A_m} \right) RT \frac{dV}{V} = L dM_p, \quad (2.24)$$

где A_i — молекулярные массы; L — удельная теплота конденсации. Вводя степень конденсации $x = M_p / (M_p + M_v) = M / (M + \rho_v)$ и безразмерные теплоемкости $c_i = C_{vi} A_i / R$, имеем окончательно (Голубев и др., 1991)

$$d_t \left\{ T(a c_m + (1 - x) c_v + x c_p) - \frac{Ux}{R} \right\} = -T(a + 1 - x) d_t \ln V. \quad (2.25)$$

Параметр a определяется по формуле $a = \rho_m A_v / \rho_c A_m$, где $\rho_c = \rho_c + M$ — суммарная плотность конденсирующегося вещества на данный момент времени; M — массовая концентрация капель; ρ_v , ρ_m — плотности пара и среды-носителя; $U = L A_v$ — теплота конденсации на моль. Отметим, что при выводе уравнения баланса (2.25) мы считали теплоемкости постоянными, что имеет место для ограниченного диапазона изменения температуры T .

Итак, уравнение теплового баланса с учетом конденсационных процессов сформулировано. Поведение степени конденсации x со временем определяется путем решения кинетического уравнения (2.15) с учетом реальной зависимости величин r_* , J , $v(g)$ от температуры $T(t)$, плотности пара $n_v(t)$ и пересыщения $S(t)$. При этом следует учесть, что

$$n_v(t) = [1 - x(t)] n_v(0) \frac{V(0)}{V(t)}, \quad (2.26)$$

а для нахождения $S(t) = p_v(t)/P_s[T(t)]$ необходимо использовать зависимость давления насыщенного пара от температуры, которая в справочной литературе обычно представляется в виде интерполяции (см. формулу (1.25) гл. 1)

$$P_s(T) = \exp \left\{ -\frac{A_s}{T} + B_s + C_s \ln T + D_s T \right\}, \quad (2.27)$$

где A_s , B_s , C_s , D_s — некоторые константы. Таким образом, при заданном законе изменения $V(t)$ (скажем, из газодинамических расчетов) уравнения (2.15), (2.25) вместе с определением величин r_* , J , $v(g)$ (например, по соотношениям (2.16), (2.18), (2.22)) представляют собой замкнутую систему, определяющую поведение термодинамических величин и спектра частиц при флуктуационном зародышеобразовании и конденсационном росте. Дополнительное к (2.15) общее изменение концентраций $f(g, t)$, возникающее за счет вариации $V(t)$, очевидно и должно учитываться отдельным образом.

В заключение рассмотрим более сложную модель теплообмена, учитывающую разность температур между каплями и газовой средой, возникающую в динамических процессах роста и испарения капель. Из-за сильной зависимости давления насыщающих паров от температуры возможно заметное влияние этой разности температур на скорость процессов испарения и конденсации, несмотря на то, что сама эта разность может быть невелика.

Скорость роста и испарения капли i за счет конденсации $v_{gi} = d_t g_i$ входит в кинетическое уравнение (2.15) в таком же виде, как и ранее, и по-прежнему определяется формулой (2.22). Однако многие параметры, определяющие значения v_{gi} , теперь зависят от температуры поверхности каждой капли, поскольку потоки частиц пара в каплю и из капли определяются температурой вблизи ее поверхности. Чтобы

подчеркнуть это различие, мы будем снабжать индексом i индивидуальные для каждой капли величины (например, g_i — число молекул в капле, T_i — температура ее поверхности).

Температуры у поверхности капель будем находить из уравнений энергетического баланса. Количество тепла, выделяющегося в капле в единицу времени, запишем в виде $Q_{1i} = k U d_i g_i / R$, где g_i — число молекул в капле. Количество тепла, передаваемого каплей газу, $Q_{2i} = 4\pi \chi r_i (T_i - T_\infty) / \gamma_i$, где r_i — радиус капли; T_∞ — температура газовой смеси на бесконечности; γ_i — коэффициент, определяемый по формуле (Амелин, 1972)

$$\gamma_i = \frac{1}{1 + \text{Kn}_i} + \frac{B \text{Kn}_i}{\beta}.$$

Здесь $\text{Kn}_i = \lambda_v(T_i) / r_i$ — число Кнудсена; λ_v — пробег молекул пара в среде; $B = 3,17$; β — коэффициент термической аккомодации (обычно его полагают близким к единице); $\chi(\bar{T})$ — коэффициент теплопроводности газовой смеси; $\bar{T}$ — средняя температура газовой смеси.

Таким образом, уравнение энергетического баланса отдельной капли может быть записано в виде (Goncharov, 1996):

$$\frac{U}{R} \frac{dg_i}{dt} - \frac{4\pi \chi r_i}{k \gamma_i} (T_i - T_\infty) = c_p g_i \frac{dT_i}{dt} + (c_p - c_v) T_i \frac{dg_i}{dt}. \quad (2.28)$$

Уравнение энергетического баланса всей системы представим в виде

$$\sum_i n_i \left\{ \left[(c_p - c_v) T_i - \frac{U}{R} \right] \frac{dg_i}{dt} + c_p g_i \frac{dT_i}{dt} \right\} + (n_m c_m + n_v c_v) \frac{d\bar{T}}{dt} = -\bar{T} (n_v + n_m) \frac{d(\ln V)}{dt}, \quad (2.29)$$

где n_i — концентрация капель, состоящих из g_i молекул; n_v и n_m — концентрации конденсирующегося пара и вещества среды соответственно, а V — объем газовой смеси.

Связь между температурами T_∞ и $\bar{T}$ можно получить, используя модель ячеек. Суть модели состоит в том, что вокруг каждой капли выделяется сфера радиусом R_i из условия, что температура на границе ячеек одинакова, а сумма по объемам всех ячеек дает полный объем рассматриваемой газовой среды. Кроме того, представим температуру газа на расстоянии r от центра капли в виде решения диффузионного уравнения $T(r) = r_i (T_i - T_\infty) / r + T_\infty$. После несложных выкладок получим необходимую связь между температурами в виде

$$\bar{T} = T_\infty + \frac{3}{2} \left[\frac{4\pi}{3V} \sum_i r_i^3 (T_i - T_\infty)^3 \right]^{1/3}. \quad (2.30)$$

Обычно второй член в правой части этого уравнения мал, так как его величина характеризуется множителем порядка отношения размера капли к расстоянию между каплями. Поэтому приближение $\bar{T} = T_\infty$ зачастую является достаточно точным.

Итак, мы получили систему уравнений (2.28), (2.29) и (2.30), которая заменяет уравнение теплового баланса (2.25) и позволяет найти величины T_i , $\bar{T}$, T_∞ , необходимые для решения кинетического уравнения конденсации при разных температурах капель и среды.

2.4. Решения кинетического уравнения конденсации. Анализ упрощенной модели

Решение кинетического уравнения с помощью метода характеристик. Анализ начнем с более общего варианта кинетического уравнения (2.8). С математической точки зрения уравнение (2.8) с начальными условиями является квазилинейным уравнением первого порядка, рассматриваемым на полуоси $g \geq 0$, задача Коши для которого обычно решается методом характеристик (Карташев, Рождественский, 1976). Характеристиками уравнения (2.8) называются траектории изменения масс частиц $G(t, g_0)$, выходящие при $t = 0$ из точки g_0 и подчиняющиеся дифференциальному уравнению

$$d_t G = v(G, t). \quad (2.31)$$

Рассматривая решение (2.8) $f(g, t)$ как сложную функцию от аргумента t , легко получить уравнение, определяющее поведение решения $f[G(t), t]$ вдоль траектории $G(t)$:

$$d_t f = -f \partial_G v(G, t) + I(G, t). \quad (2.32)$$

Поскольку решение (2.32) зависит от стартового значения $f_0 = f_s(g_0)$ и значения G в начальной точке g_0 , то удобно отразить эти зависимости в аргументах: $f[G(t), t] = F(t, g_0, f_0)$. Для получения окончательного аналитического выражения для $f(g, t)$ нужно выбрать характеристику, которая в момент времени t проходит через точку g . Для этого необходимо разрешить уравнение $G(t, g_0) = g$ относительно $g_0 = g_0(g, t)$. В случае, когда это удастся сделать аналитически, общее решение задачи Коши имеет вид

$$f(g, t) = F\{t, g_0(g, t), f_s[g_0(g, t)]\}, \quad (2.33)$$

где $g_0(g, t)$ — решение уравнения

$$G[t, g_0(g, t)] = g. \quad (2.34)$$

Исследование поведения характеристик удобно при качественном анализе решений уравнения (2.8). Кроме того, как будет продемонстриро-

вано ниже, с помощью метода характеристик можно получить общие аналитические решения для достаточно простых, но реалистичных функций $v(g, t)$ (Пискунов, 1984).

Для уравнения гомогенной нуклеации (2.15), в котором зависимость спектра источника от масс частиц имеет вид дельта-функции: $I(g, t) = J(t) \delta[g - \tilde{g}(t)]$, можно получить решение при нулевом начальном спектре $f_s(g_0) = 0$:

$$f_J(g, t) = f_1(g, t) \{ \theta [G(t, \tilde{g}_0) - g] - \theta [\tilde{g}(t) - g] \}, \quad (2.35)$$

где θ — э́та-функция, такая, что $\theta(x) = 0$ при $x < 0$ и $\theta(x) = 1$ при $x > 0$; G — характеристика, выходящая из точки $\tilde{g}_0$. Подстановкой (2.35) в (2.15) можно убедиться, что функция f_1 должна удовлетворять однородному уравнению

$$\partial_t f_1 + \partial_g (v f_1) = 0 \quad (2.36)$$

и граничному условию

$$f_1(\tilde{g}, t) = \frac{J(t)}{v(\tilde{g}, t) - d_t \tilde{g}} \quad (2.37)$$

на подвижной границе $g = \tilde{g}(t)$. В этом решении не накладывается никаких условий на явный вид функции $v(g, t)$.

Решение (2.35) выглядит в виде полочки, одним из фронтов которой служат растущие по характеристикам капли, родившиеся в начальный момент времени в точке $\tilde{g}_0$, а другим — вновь рождающиеся зародыши. Полочка «промодулирована» функцией f_1 . При этом необходимо учитывать, что при заходе заднего фронта (с меньшими g) в область отрицательных значений этот фронт является фиктивным, поскольку решение определено лишь при $g \geq 0$. Выражение (2.35) позволяет понять качественное поведение спектра капель, возникающих в пересыщенном паре за счет флуктуационного зародышеобразования.

Проанализируем возможные ситуации поведения характеристик и спектра капель, исходя из описанных выше закономерностей поведения скоростей конденсации и массы критической капли. На рис. 2.2, 2.3 изображено поведение массы критической капли $g_*(t)$ и величины $\tilde{g}(t) \sim g_*(t)$. На фоне этих кривых приведено поведение характеристик с учетом того, что вначале они имеют положительные скорости, затем значение $v(G, t) = 0$ при прохождении через кривую $g_*(t)$, а в дальнейшем характеристики имеют отрицательные скорости роста.

На рис. 2.2 показан случай, когда фронт полочки с $g = \tilde{g}(t)$ опережает движущийся по характеристике фронт $G(t, \tilde{g}_0)$. При этом никаких сложностей с применением решения (2.35) не возникает. В момент времени T в точке $\tilde{g}(T)$ решение f_1 принимает конкретное значение, определяемое из (2.37), и в дальнейшем трансформирует его в соответствии с уравнением (3.23) при отключенном источнике. Для поиска значения

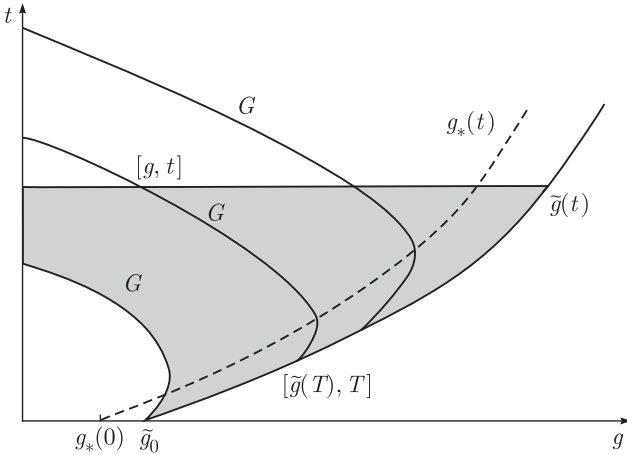


Рис. 2.2. Поведение характеристик в регулярном случае

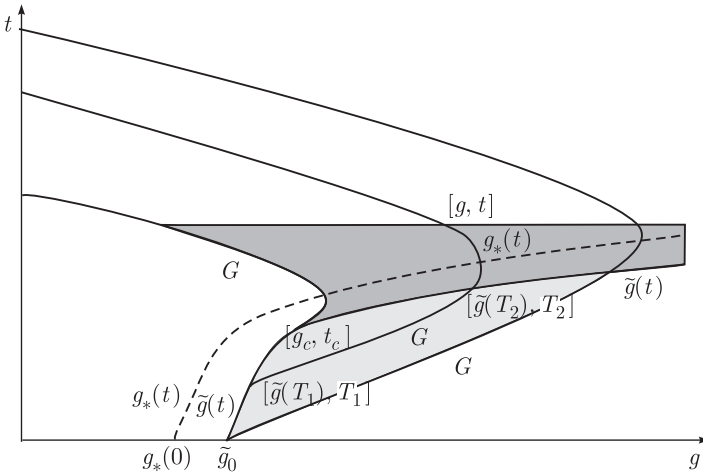


Рис. 2.3. Поведение характеристик при касании кривой $\tilde{g}(t)$

T необходимо использовать условие, что характеристика должна прийти в заранее заданную точку $[g, t]$ и одновременно начаться в более ранний момент времени T на кривой $\tilde{g}(t)$. Фактически предложенное построение дает один из рецептов определения функции $f_1(g, t)$.

Более сложный случай изображен на рис. 2.3, когда кривая $\tilde{g}(t)$ сначала имеет более слабый рост, чем выходящие из нее характеристики G , а затем начинает обгонять характеристики, начиная с некоторого момента времени t_c . На рис. 2.3 отмечена точка касания $[g_c, t_c]$ кривой $\tilde{g}(t)$ и одной из характеристик G . В этой точке знаменатель в выраже-

нии (2.37) обращается в ноль и операции с решением $f_1(g, t)$ требуют осторожности. Детальный анализ показывает, что в момент времени t_c в спектре возникает интегрируемая сингулярность и одновременно при $t > t_c$ происходит разбиение спектра на две части: одна по-прежнему определяется текущими значениями источника и находится из (2.35), а вторая меняется вдоль сформированных ранее характеристик и от новых значений источника уже не зависит.

Поведение решений при больших временах определяется тем, что источник асимптотически должен прекращать свое действие, поскольку он не может поставить в систему массу капель, большую, чем избыток пара. Поэтому для анализа достаточно исследовать свойства решений кинетического уравнения конденсации без источника. Такой анализ проведен в работе (Пискунов, 1984), где показано, что в асимптотическом режиме реализуется автомодельное распределение капель по размерам, при этом масса критической капли и средняя масса капель в спектре растут по степенному закону. В целом автомодельный спектр составлен как из закритических, так и докритических капель, «обменивающихся» между собой паром. Рис. 2.3 иллюстрирует, каким образом в спектре, расположенном при $t < t_c$ целиком в закритической области, начинают появляться докритические капли при $t > t_c$.

Решение модельной задачи. Получим решение кинетического уравнения с источником (2.8) для модельного случая, когда скорость конденсации и связь между $g_*(t)$ и $M(t)$ имеют вид (Пискунов, 1984)

$$v(g, t) = \chi \left(\frac{g}{g_*(t)} - 1 \right); \quad g_*(t) = \frac{1 - M(0)}{1 - M(t)}, \quad (2.38)$$

где χ — некоторая константа. При этом концентрации пара и капель нормированы на финальное значение $M(\infty) \equiv (\rho_c - \rho_s)$ (напомним, что $\rho_c = \rho_v + M$, а ρ_s — плотность насыщенного пара), а масштаб по g — на значение массы критической капли в начальный момент времени $g_*(0)$. Зависимости (2.38) представляются достаточно реалистичными, поскольку они качественно отражают необходимые свойства поведения скорости конденсации и массы критической капли, описанные выше. В реальных случаях эти зависимости несколько сложнее. Например, согласно (2.16), (2.21) для пересыщений S , близких к единице, и при диффузионном режиме подвода пара к каплям

$$v(g, t) = \chi \left[\left(\frac{g}{g_*(t)} \right)^{1/3} - 1 \right]; \quad g_*^{1/3}(t) = \frac{1 - M(0)}{1 - M(t)}. \quad (2.39)$$

Решение уравнения характеристик (2.31) для модельной зависимости $v(g, t)$ из (2.38) имеет вид

$$G(t, g_0) = \frac{1}{u(t)} \left[g_0 - \chi \int_0^t u(\tau) d\tau \right]; \quad u(t) = \exp \left(-\chi \int_0^t \frac{d\tau}{g_*(\tau)} \right). \quad (2.40)$$

Для анализа поведения спектра получим сначала решения однородного уравнения (2.32) при $I = 0$. В этом случае (2.32) имеет решение $f[G(t), t] = Cu(t)$. Константу C определим из условия, что $f|_{t=0} = f_0 = f_s(g_0)$, т. е. $C = f_0$. Таким образом,

$$F(t, g_0, f_0) = f_0 u(t) = f_s(g_0) u(t).$$

Используя явное выражение для G из (2.40), находим точку $g_0(g, t)$, из которой должна выходить характеристика при $t = 0$, чтобы в момент времени t попасть в точку g . Окончательное решение задачи без источника при произвольных начальных спектрах $f_s(g)$ имеет вид (Пискунов, 1984):

$$\begin{aligned} g_0(g, t) &= gu(t) + \chi \int_0^t u(\tau) d\tau; \\ f_{\text{free}}(g, t) &= u(t) f_s \left[gu(t) + \chi \int_0^t u(\tau) d\tau \right]. \end{aligned} \quad (2.41)$$

С помощью простых выкладок для модельной задачи (2.38) можно найти частное решение неоднородного кинетического уравнения при нулевых начальных условиях. Уравнение (2.32) имеет в этом случае решение

$$f_I[G(t), t] = u(t) \int_0^t \frac{I[G, \tau]}{u(\tau)} d\tau, \quad (2.42)$$

где G — характеристика. Для получения явного вида $f_I(g, t)$ необходимо определить конкретные аргументы у $G(t, g_0)$ в подынтегральном выражении. Ясно, что текущим временем должно служить τ , а значение g_0 должно быть одним и тем же для всех характеристик и определяться из условия (2.34), поскольку мы ищем решение в точке g в момент времени t . Следовательно,

$$\begin{aligned} f_I[g, t] &= u(t) \int_0^t \frac{I\{G[\tau, g_0(g, t)], \tau\}}{u(\tau)} d\tau; \\ G[\tau, g_0(g, t)] &= g \frac{u(t)}{u(\tau)} + \frac{\chi}{u(\tau)} \int_\tau^t u(s) ds. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Полное решение определяется суммой общего решения (2.41) для однородного уравнения и частного решения (2.43) для уравнения с источником. При этом необходимо также использовать связи, определяемые вторыми соотношениями в (2.38), (2.40).

Особый интерес представляет случай гомогенной нуклеации с источником (2.15). Для анализа достаточно ограничиться нулевыми начальными условиями. При этом более удобно пользоваться решением

(2.35) с учетом (2.40):

$$\begin{aligned} f_J(g, t) &= f_1(g, t) \{ \theta[G(t, \tilde{g}_0) - g] - \theta[\tilde{g}(t) - g] \}; \\ G(t, \tilde{g}_0) &= \frac{1}{u(t)} \left[\tilde{g}_0 - \chi \int_0^t u(\tau) d\tau \right]. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Для нахождения f_1 необходимо использовать граничное условие

$$f_1(\tilde{g}, t) = \frac{J(t)}{\chi(\tilde{g}/g_* - 1) - d_t \tilde{g}} \equiv \varphi(t) \quad (2.45)$$

на подвижной границе $g = \tilde{g}(t)$ и тот факт, что f_1 является решением однородного уравнения (2.36). Из предыдущих выкладок ясно, что для модели (2.38) вдоль характеристик G сохраняется величина $f_1[G(s), s]/u(s)$. Чтобы получить решение задачи $f_1(g, t)$, выберем характеристику, проходящую через точку g в момент времени t и одновременно через точку $G(T)$ в момент времени T , тогда

$$f_1(g, t) = \frac{u(t)}{u(T)} f_1[G(T), T].$$

Определим T из условия, что $G(T) = \tilde{g}(T)$, тогда для нахождения $T(g, t)$ получим из (2.40) трансцендентное уравнение

$$\tilde{g}(T) u(T) = g u(t) + \chi \int_T^t u(\tau) d\tau. \quad (2.46)$$

Учитывая граничное условие (2.45), получаем окончательно

$$f_1(g, t) = \frac{u(t)}{u(T)} \varphi[T(g, t)]. \quad (2.47)$$

Уравнения (2.38), (2.44)–(2.47) полностью определяют спектр частиц в модельной задаче для дельта-источника и нулевых начальных условий. В соответствии с различными картинками поведения характеристик, изображенными на рис. 2.2, 2.3, уравнение (2.46) может иметь либо один, либо два корня. В первом случае, показанном на рис. 2.2, никаких сложностей с применением решения (2.44) не возникает (на рис. 2.2 для определенности принято, что фронт полочки с $g = \tilde{g}(t)$ в выражении (2.44) опережает фронт $G(t, \tilde{g}_0)$, движущийся по характеристике). Во втором случае при $t < t_c$ (см. рис. 2.3) решение (2.47) должно использовать корень (2.46), для которого $T = T_1 < t$, иначе в (2.47) появятся аргументы, в которых источник оказывает свое влияние на спектр «заранее», т. е. решение (2.47) не будет иметь смысла. При $t > t_c$ нужно использовать сумму двух решений: одно по-прежнему

определяется текущим действием источника и находится по формуле (2.47) (берется ближний к t корень $T = T_2$ уравнения (2.46), а второе — сингулярное — меняется вдоль сформированных ранее характеристик и от новых значений источника уже не зависит. Напомним также, что при численном решении дополнительно должно контролироваться условие перехода фронта $G(t, \tilde{g}_0)$ через нулевую границу.

Рассмотрим более подробно, как протекает начальная стадия гомогенной нуклеации в модельной задаче. Время t возьмем настолько малым, что изменением массовой концентрации пара, интенсивности источника и массы критической капли можно пренебречь: $n_v(t) = \text{const}$; $J(t) = \text{const}$; $g_*(t) = \text{const} = 1$. Для этого, по крайней мере, должно выполняться условие

$$J\tilde{g}_0 t \ll n_v(0). \quad (2.48)$$

Рождающиеся капли будем считать закритическими: $\tilde{g}(t) = \tilde{g}_0 > 1$. Из (2.40), (2.45) видно, что

$$u(t) = \exp(-\chi t); \quad G(t, \tilde{g}_0) = (\tilde{g}_0 - 1) \exp(\chi t) + 1; \quad \varphi = \frac{J}{\chi(\tilde{g}_0 - 1)}.$$

Само решение f_1 зависит от g и меняется вдоль характеристик в соответствии с (2.47). Разрешая уравнение (2.46) относительно T и подставляя в (2.47), получаем спектр капель, которые родились от источника и выросли затем за счет конденсации к моменту времени t :

$$f_1(g, t) J / (\chi(g - 1)); \quad \tilde{g}_0 \leq g \leq G(t, \tilde{g}_0). \quad (2.49)$$

Интегрирование по спектру в правой части (2.10) дает

$$d_t M = J\tilde{g}_0 + J(\tilde{g}_0 - 1)(e^{\chi t} - 1). \quad (2.50)$$

Сначала растущие за счет конденсации капли не дают вклада в изменение массовой концентрации из-за малой ширины полочки, но при больших временах они могут превысить вклад, обусловленный поступлением массы от источника. Если при выполнении (2.48) одновременно выполняется условие $\exp(\chi t) \gg 1 + \tilde{g}_0/(\tilde{g}_0 - 1)$, то появившиеся при гомогенной нуклеации закритические капли растут настолько «бурно», что именно этот рост будет в дальнейшем определять характер изменения массовой концентрации.

2.5. Оценки для начальной стадии процессов нуклеации и конденсации в облаке

Общие формулы для скоростей конденсационных процессов.

В реальных случаях для определения скоростей конденсации, интенсивности источника и массы капли критического размера необходимо знать текущие значения счетной концентрации пара $n_v(t)$ и давления насыщенного пара $P_s(t) = P_s[T(t)]$. Счетная концентрация пара

$n_v(t)$ определяется из очевидного соотношения $n_v(t) = N_A \rho_v(t) / A_v$, где N_A — число Авогадро, а плотность пара $\rho_v(t)$ рассчитывается из условия сохранения суммарной массы конденсирующегося вещества в парообразном и жидком состояниях: $\rho_c = \rho_v(t) + M(t) = \text{const}$. Для зависимости давления насыщенного пара от температуры $P_s(T)$ будем использовать интерполяционную формулу (2.27).

При проведении численных оценок величин g_* , $v(g)$, J удобно ввести следующие константы с размерностью температуры:

$$T_c = \frac{U}{R}, \quad T_\sigma = \frac{\sigma d_v^2}{k}, \quad (2.51)$$

и характерную частоту ν_f для процессов столкновений молекул пара с поверхностью капли:

$$\nu_f = n_v v_{vT} \pi d_v^2 / 4; \quad [\nu_f] = \frac{1}{c}. \quad (2.52)$$

Тогда основные формулы (2.16), (2.18), (2.22) перепишутся в более компактном виде:

$$g_* = \left(\frac{2\pi T_\sigma}{3T \ln S} \right)^3; \quad (2.53)$$

$$v(g, t) = \frac{\alpha \nu_f g^{2/3}}{1 + \frac{3\alpha d_v}{8\lambda_v g^{1/3}}} \left\{ 1 - \exp \left[\ln S \left(\left(\frac{g_*}{g} \right)^{1/3} - 1 \right) \right] \right\}; \quad (2.54)$$

$$J(t) = \frac{\alpha n_v \nu_f}{3} \sqrt{\frac{T_\sigma}{T}} \exp \left(-\frac{g_* \ln S}{2} \right), \quad (2.55)$$

где d_v — диаметр молекулы пара, а все массы частиц выражены в числе молекул. Поскольку далее для определенности мы будем рассматривать кинетику конденсации при постоянном объеме, то уравнение теплового баланса (2.25) примет вид

$$d_t \{T(ac_m + (1-x)c_v + xc_p) - xT_c\} = 0. \quad (2.56)$$

Характерные параметры для водяного облака. Оценки проведем для температуры в облаке $T = 268,6$ К и плотности воздуха $\rho_m = 0,909$ кг/м³. Водность облака положим равной $\rho_c = 2 \cdot 10^{-2}$ кг/м³ и будем считать, что в начальный момент капли отсутствуют. Значения других параметров, существенных для кинетики конденсации, следующие: $\sigma = 0,074$ Н/м; $\alpha = 1$; $c_m = 2,503$; $c_v = 3,2$; $c_p = 9,1$; $U = 4,5 \times 10^4$ Дж/моль; $A_s = 7,235 \cdot 10^3$; $B_s = 77,376$; $C_s = -8,21$; $D_s = 5,8 \times 10^{-3}$; $A_v = 18,01$; $A_m = 29$; $d_m = 3,6 \cdot 10^{-10}$ м; $\rho_p = 10^3$ кг/м³. Кинетическое уравнение (2.15) описывает процессы конденсации при

гомогенной нуклеации аэрозолей. Чтобы учесть процессы гетерогенной конденсации (например, на атмосферных ядрах конденсации), необходимо задать начальные спектры аэрозолей и в дальнейшем рассчитывать их конденсационный рост. Нами будет учитываться наличие в атмосфере частиц Айткена. Их радиус взят равным $3 \cdot 10^{-8}$ м, счетная концентрация $N_a = 9,5 \cdot 10^9$ част./м³ (характерная концентрация над сушей) (Юнге, 1965).

Общие формулы для спектра частиц и динамики изменения характерных величин. Как мы покажем ниже, на начальной стадии процесса для нашего конкретного случая хорошо выполняется приближение $g_*(t) = \text{const}$, $S = \text{const}$, $T = \text{const}$. Из явного выражения (2.54) для скорости конденсации видно, что в этом случае функция v не зависит явно от времени. Легко убедиться в том, что для произвольных скоростей конденсации v , не зависящих явно от времени: $v(g, t) = v(g)$, решение (2.36), удовлетворяющее граничному условию (2.37), следующее: $f_1(g, t) = J/v(g)$. Это решение отвечает условию постоянства потока в пространстве масс частиц g . Правая часть уравнения (2.10) для изменения массовой концентрации легко интегрируется по спектру частиц, что дает, с учетом частиц Айткена, следующий результат (здесь M выражено в числе молекул на единицу объема):

$$d_t M = -d_t n_v = JG(t, \tilde{g}_0) + N_a v[G(t, g_a)]. \quad (2.57)$$

Таким образом, для оценки скорости изменения массовой концентрации капель $M(t)$ (тем самым и концентрации пара n_v) достаточно знать текущие массы капель $G(t, b)$, стартовавших с начальных масс $b = \tilde{g}_0$ и $b = g_a$. Закон изменения величины $G(t, b)$ задается уравнением (2.31) со скоростями v из (2.54). Закритические капли проходят три стадии роста. Сначала происходит выход из области критического размера за характерное время $\tau_0 = \tilde{g}_0/[v(\tilde{g}_0, 0)]$, затем за время $\tau_1 = 3\lambda_v/(\alpha\nu_f d_v)$ капли дорастают до размера порядка пробега молекул пара в среде λ_v и, наконец, наступает диффузионный режим роста капель, когда $G^{1/3} d_v \gg \lambda_v$ и одновременно $G \gg g_*$:

$$d_t G = 8\alpha\lambda_v\nu_f G^{1/3} \frac{S-1}{3d_v S}. \quad (2.58)$$

Решение (2.58) практически не зависит от стартовой массы закритической капли, лишь бы эта масса имела скорость v , значительно превышающую скорость изменения величины $\tilde{g}(t)$. Частицы Айткена практически сразу растут в соответствии с уравнением (2.58). Подставляя численные значения, получаем закон роста $G(t)$ в диффузионном режиме для наших конкретных условий:

$$G \approx (1,53 \cdot 10^{10} t)^{3/2} \quad (2.59)$$

($[G]$ = число молекул, $[t]$ = с). Условие $G^{1/3}d_v \gg \lambda_v$ выполняется при $t \gg 3,71 \cdot 10^{-6}$ с, но фактические времена выхода на диффузионный режим, как мы увидим ниже, могут лимитироваться значениями τ_0 , τ_1 . Подчеркнем также, что капли, первоначально имевшие ровно критический размер, при условии $g_*(t) = \text{const}$ не растут вообще.

Характерные времена для процессов, дающих вклад в уравнение баланса (2.57), следующие:

$$\tau_J = \frac{n_v}{JG}; \quad \tau_a = \frac{n_v}{N_a v(G)}; \quad \tau = \frac{-n_v}{dn_v/dt}; \quad \frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_J} + \frac{1}{\tau_a}. \quad (2.60)$$

Для оценки скорости изменения массы критической капли необходимо привлечь уравнение теплового баланса (2.56), поскольку наиболее существенный вклад в увеличение g_* дает снижение пересыщения при выделении тепла за счет конденсации. Используя (2.27), (2.53) и (2.56), получаем

$$\frac{1}{\tau_{g_*}} = \frac{1}{g_*} \frac{dg_*}{dt} = \frac{3}{\tau \ln S} \times \\ \times \left\{ 1 + \left(\frac{A_s}{T} + C_s + D_s T - \ln S - 1 \right) \left[\frac{T_c + T(c_v - c_p)}{T(ac_m + c_v)} \right] \right\}. \quad (2.61)$$

Численные оценки. Для указанных выше условий и конкретных параметров получаются следующие численные значения характерных величин в начальный момент времени $t = 0$:

$$p_v = 2,48 \cdot 10^3 \text{ Па}; \quad P_s = 4,36 \cdot 10^2 \text{ Па}; \quad S = 5,69; \quad \ln S = 1,74; \\ T_c = 5413 \text{ К}; \quad T_\sigma = 795,3 \text{ К}; \quad g_* = 45,4 \text{ мол.}; \quad d_v = 3,85 \cdot 10^{-10} \text{ м}; \\ \lambda_v = 9,16 \cdot 10^{-8} \text{ м}; \quad \nu_f = 4,38 \cdot 10^7 \text{ 1/с}; \quad J = 1,21 \cdot 10^{14} \text{ 1/(м}^3 \cdot \text{с)}.$$

Сравнивая значение $Jg_* = 5,49 \cdot 10^{15}$ мол./($\text{м}^3 \cdot \text{с}$) со значением $N_a v(g_a) = 6,62 \cdot 10^{21}$ мол./($\text{м}^3 \cdot \text{с}$), видим, что поглощение пара частицами Айткена дает гораздо больший вклад, чем снижение концентрации пара за счет рождения капель от источника. Подставляя τ в формулу (2.61), получаем характерное время для изменения массы критической капли в начальный момент времени $\tau_{g_*} \sim 13$ с, при этом начальная скорость $d_t g_* = 3,40$ мол./с. Для сравнения приведем стартовые значения $v(g)$ для капель с массой вблизи критической: $v(g) = 4,11 \cdot 10^6$ мол./с для $g = 46$ мол.; $v(g) = 3,17 \cdot 10^7$ мол./с для $g = 50$ мол. В соответствии с этим времена роста частиц, располагавшихся вблизи критического размера, составляют $\tau_0 = 10^{-6} - 10^{-5}$ с. Видно, что типичные закритические капли, которые могут рождаться в источнике, растут намного быстрее, чем масса критической капли; при этом можно считать, что g_* вообще не меняется до моментов

времени $t \leq 1$ с. То же самое справедливо и для концентрации пара, температуры, а также интенсивности источника. Следовательно, приближение $n_v(t) = \text{const}$; $J(t) = \text{const}$; $g_*(t) = \text{const}$; $T = \text{const}$, которым мы воспользовались заранее, достаточно хорошо работает в начальные моменты времени.

Проведем аналогичные оценки для момента времени $t = 10^{-3}$ с. Предварительно оценим время роста капель до размеров порядка длины свободного пробега:

$$\tau_1 = \frac{3\lambda_v}{\alpha\nu_f d_v} \approx 1,5 \cdot 10^{-5} \text{ с.}$$

Следовательно, для времени $t = 10^{-3}$ с мы заведомо можем пользоваться диффузионным законом роста (2.58). Из приближенной формулы (2.59) получаем значение $G = 5,96 \cdot 10^{10}$, при этом $v(G) = 7,68 \times 10^{13}$ мол./с. Следовательно, характерные времена конденсации на частицах Айткена и на каплях, рождаемых источником, составляют $\tau_a = 0,916$ с, $\tau_J = 4,84 \cdot 10^4$ с, т. е. при временах $t = 10^{-3}$ с по-прежнему быстрее идет процесс поглощения пара каплями, сформировавшимися на частицах Айткена. Отметим, что при $t = 10^{-3}$ с значение $\tau_{g_*} = 1,2 \times 10^{-2}$ с, т. е. приближение $g_* = \text{const}$ еще достаточно приемлемо, но будет нарушаться при увеличении t примерно на порядок.

Результаты приведенных оценок показывают, что для реальных зависимостей скорости конденсации от размеров частиц влияние стартовой массы $\tilde{g}$ закритического зародыша несущественно, лишь бы величина $\tilde{g}$ превышала g_* . Тем самым наряду с формулой (2.23) для $\tilde{g}$ в расчетах можно использовать, например, значения $\tilde{g} = 1,1-2g_*$, которые использовались в методике (Голубев и др., 1991) и давали устойчивые результаты. Кроме того, оценки показывают, что в облачных процессах наиболее важным является поглощение пара атмосферными ядрами конденсации. Отметим также, что в реальных задачах необходимо учитывать влияние коагуляции, которая сдвигает спектр в область больших размеров и способствует трансформации критических зародышей в закритические.

2.6. Асимптотическая стадия процесса конденсации

Займемся теперь асимптотической стадией процесса конденсации при больших временах ($t \rightarrow \infty$). Эта стадия характеризуется тем, что практически весь избыток пара выпадает в конденсат: $M(t) \gg \delta(t) \equiv [\rho_v(t) - \rho_s]$ (здесь ρ_s — плотность насыщенного пара над плоской поверхностью), а пересыщение S стремится к единице. Наиболее полно процесс конденсации при слабых пересыщениях ($S \approx 1$) исследован в работе (Лифшиц, Слезов, 1958). Фундаментальная работа Лифшица–Слезова посвящена процессу диффузионного роста зерен

новой фазы в пересыщенных твердых растворах и послужила основой для целой серии исследований в области физики твердого тела и физики атмосферных аэрозолей. Обзор этих работ содержится в статьях (Слезов, Сагалович, 1987; Пискунов, 1984). Мы займемся только основными чертами этой модели, имея в виду процесс конденсации капель в слабо пересыщенном паре (Пискунов, 1984).

При слабых пересыщениях флуктуационное зародышеобразование практически подавлено, поэтому источник в кинетических уравнениях (2.8), (2.15) можно отбросить:

$$\partial_t f(g, t) + \partial_g [v(g, t) f(g, t)] = 0. \quad (2.62)$$

Капли будем считать большими по сравнению с пробегом молекул пара в среде λ_v , следовательно, подвод пара к поверхности капель носит диффузионный характер и скорость роста $v(g)$ определяется формулой (2.21). Температуру возьмем постоянной, поскольку при слабых пересыщениях выделение тепла ничтожно мало. При решении (2.62) учтем закон сохранения массы

$$\delta(t) + M(t) = \delta(0) + M(0) = (\rho_c - \rho_s) \equiv Q = \text{const}. \quad (2.63)$$

Из равенства (2.16) для критического размера следует, что $r_* \sim g_*^{1/3} \sim \delta^{-1}$. Переходя к безразмерному времени χt и нормируя спектр $f(g, t)$ на значение Q , получаем

$$\partial_t f(g, t) + \partial_g \left\{ [(g/g_*)^{1/3} - 1] f(g, t) \right\} = 0; \quad (2.64)$$

$$\left[\frac{g_*(t)}{g_*(0)} \right]^{1/3} = \frac{1 - M(0)}{1 - M(t)}; \quad M(t) = \int_0^\infty g f(g, t) dg. \quad (2.65)$$

Уравнения (2.64), (2.65) представляют собой замкнутую нелинейную систему, определяющую динамику процесса конденсации при слабых пересыщениях.

В асимптотической стадии процесса $M(t) \rightarrow 1$, $g_* \rightarrow \infty$, т.е. практически весь избыток вещества выпадает в конденсат, критический размер увеличивается, а закритические капли в основном поглощают пар, получившийся при испарении докритических частиц. Рассмотрим сначала асимптотическое поведение спектра в модельной задаче (2.38), для которой кинетическое уравнение (2.62) имеет аналитическое решение (2.41) при произвольных начальных спектрах f_s . Из решения (2.40), описывающего поведение характеристик, видно, что на момент времени t за счет испарения погибают все частицы начального спектра,

имевшие начальный размер $g_0 < \Phi(t) \equiv \chi \int_0^t u(\tau) d\tau$. Несложный, но

громоздкий анализ показывает (Пискунов, 1984), что для финитных начальных спектров, оканчивающихся в некоторой точке g_N^0 , асимптотический спектр определяется поведением $f_s(g)$ вблизи точки g_N^0 , поскольку имеет место $\Phi(t) \rightarrow g_N^0$, а для нефинитных начальных спектров важен характер убывания спектра f_s в области больших размеров, поскольку реализуется $\Phi(t) \rightarrow \infty$. Во всех этих случаях критический размер g_* линейно растет со временем, а асимптотические спектры, получаемые из аналитического решения (2.41), принимают универсальную форму

$$f(g, t) \underset{t \rightarrow \infty}{\approx} [g_*(t)]^{-2} \Psi\left(\frac{g}{g_*}\right); \quad \int_0^{\infty} \Psi(x) x dx = 1, \quad (2.66)$$

где конкретный вид функции $\Psi(x)$ определяется либо поведением $f_s(g)$ вблизи точки g_N^0 (для финитных f_s), либо поведением $f_s(g)$ на бесконечности (для нефинитных f_s). Тем самым при $t \rightarrow \infty$ спектр $f(g, t)$ зависит от некоторой комбинации $x = g/g_*(t)$ переменных g и t , а не от g и t по отдельности. Дополнительный множитель $[g_*(t)]^{-2}$ в (2.66) возникает из-за того, что величина $M(t)$ в асимптотическом пределе должна быть нормирована на единицу. Универсальное поведение асимптотических спектров в (2.66) обусловлено нелинейностью решаемой нами задачи и является отражением того общего факта, что для нелинейных систем асимптотические решения принимают при больших временах безразмерный автомодельный вид, устойчивый относительно возмущений начальных условий (Седов, 1967). Использование универсальной формы (2.66) для асимптотических решений кинетических уравнений конденсации и коагуляции впервые было предложено в 40-х годах в цикле работ О. М. Тодеса и наиболее полно описано в его работе (Тодес, 1949).

Вернемся к исследованию асимптотических решений кинетического уравнения конденсации для диффузионного режима с реальными скоростями (2.64), (2.65). Анализ проведем на основе гипотезы автомодельности. Подставляя (2.66) в уравнение (2.64), получаем

$$(2\Psi + x d_x \Psi) d_t g_* = x^{-2/3} \Psi / 3 + (x^{1/3} - 1) d_x \Psi. \quad (2.67)$$

Разделение переменных дает

$$g_*(t) = Ct; \quad d_x \Psi = \Psi(x) \frac{(6C - x^{-2/3})}{3(x^{1/3} - 1 - Cx)}. \quad (2.68)$$

Вводя новую независимую переменную $u = x^{1/3}$, окончательно имеем

$$d_u \Psi = \Psi(u) \frac{(6Cu^2 - 1)}{(u - 1 - Cu^3)}; \quad C > 0. \quad (2.69)$$

При $C > 4/27$ полином $P(u) = u - 1 - Cu^3$ не имеет корней на действительной положительной полуоси; функция $\Psi(x)$ убывает при $x \rightarrow \infty$ слишком медленно ($\Psi(x) \sim x^{-2}$), чтобы выполнялось условие нормировки в (2.66). При $C = 4/27$ один корень $u_1 < 0$, а положительные корни совпадают: $u_2 = u_3 = 3/2$. Функция $\Psi(u)$ в этом случае описывает хорошо известное асимптотическое решение Лифшица–Слезова:

$$\Psi(u) = A \frac{\exp[(2u/3 - 1)^{-1}]}{(u + 3)^{7/3} (3/2 - u)^{11/3}}; \quad 0 \leq u \leq 3/2, \quad (2.70)$$

где A — нормировочная константа. Это решение было получено в работе (Лифшиц, Слезов, 1958) на основе детального анализа поведения решений кинетического уравнения (2.64). При $C < 4/27$ имеем целый набор автомодельных асимптотических распределений $\Psi(u)$, сосредоточенных на промежутке $0 \leq u \leq u_2$ (корни полинома $P(u)$ расположены в порядке возрастания: $u_1 \leq u_2 \leq u_3$, причем $u_1 < 0$). При стремлении $u \rightarrow u_2$ слева эти решения ведут себя степенным образом: $\Psi(u) \sim (u_2 - u)^\alpha$, а при $u > u_2$ равны нулю. Например, если $C = 25/216$, то $u_2 = 6/5$, $\alpha = 0$ и функция $\Psi(u)$ испытывает разрыв, причем $\Psi(6/5)$ — конечная величина. Эти решения получены и проанализированы в статье (Пискунов, 1984), где с помощью численных расчетов показано, что такие случаи асимптотического поведения реализуются для финитных начальных распределений со степенным поведением $f_s(g)$ вблизи точки g_N^0 . По-видимому, эти решения не являются устойчивыми ко всем возмущениям, поскольку максимальная скорость роста критического размера достигается именно для решения Лифшица–Слезова. Тем не менее, как показывают расчеты, дополнительные решения могут служить хорошей промежуточной асимптотикой, устойчивой в своем классе возмущений.

Формулировка и применение гипотезы автомодельности для описания асимптотической стадии процессов формирования частиц в дисперсных системах имеет весьма сложную и драматичную историю. Впервые эта гипотеза была сформулирована для кинетического уравнения конденсации О. М. Тодесом в 40-х годах. Однако при анализе решений автомодельных уравнений кинетики конденсации О. М. Тодесом была допущена неточность, что послужило отправной точкой для строгого и всестороннего исследования, выполненного в конце 50-х годов в классических работах И. М. Лифшица и В. В. Слезова. Найденное ими асимптотическое распределение частиц по размерам получило названия решения Лифшица–Слезова. Эти исследования были продолжены в 80-х годах В. Н. Пискуновым, обнаружившим целый класс автомодельных решений для асимптотики процесса конденсации. Почти такая же история произошла и с исследованиями О. М. Тодеса по кинетике коагуляции. Автомодельные уравнения для кинетики коагу-

ляции, полученные О. М. Тодесом в 40-х годах, были заново «переоткрыты» в конце 50-х–начале 60-х годов С. К. Фридландером и получили название «гипотезы самосохранения Фридландера». Детальный анализ этих уравнений и поиск новых классов автомодельных распределений в теории коагуляции осуществлен в конце 70-х–начале 80-х годов А. А. Лушниковым и В. Н. Пискуновым. Не умаляя значения и результатов классических работ И. М. Лифшица, В. В. Слезова и С. К. Фридландера, следует признать пионерский характер, приоритетность и большую важность работ О. М. Тодеса для создания теоретического фундамента кинетики дисперсных систем.

2.7. О численном моделировании асимптотической стадии процесса конденсации

Перспективы создания численных методов расчета кинетики коагуляции, связанные с применением «плавающей сетки», будут детально описаны в гл. 4. Опишем более подробно перспективы метода интегральных соотношений, который может применяться для решения кинетического уравнения конденсации (2.8).

Сначала обратимся к общему анализу поведения характеристик уравнения (2.8) в асимптотической стадии. Для определенности рассмотрим ситуацию для финитных начальных спектров, оканчивающихся в некоторой точке g_N^0 (финитные начальные спектры более естественны с точки зрения численных расчетов, к тому же анализ для нефинитных начальных условий проводится аналогично и дает те же самые выводы). Мы будем рассматривать процесс развитой конденсации, для которого в асимптотической стадии $M(t) \rightarrow \text{const}$, $g_* \rightarrow \infty$, т. е. практически весь избыток вещества выпадает в конденсат, критический размер увеличивается, а закритические капли в основном поглощают пар, получившийся при испарении докритических частиц. Очевидно также, что флуктуационное рождение капель на этой стадии практически подавлено, поэтому при анализе мы отбросим источник в уравнении (2.8) (например, возьмем в качестве начального момент времени, когда источник уже практически прекратил свое действие).

Типичное поведение характеристик, выходящих из начальной области спектра $0 \leq g \leq g_N^0$, изображено на рис. 2.4. Точкой $g_0(t)$ на рисунке отмечена координата начального спектра, которая в фиксированный момент времени t достигла начала координат $g = 0$ (частица полностью испарилась). Общими особенностями поведения кривых, изображенных на рис. 2.4, являются следующие:

1. Крайняя характеристика $g_N(t)$, выходящая из граничной точки g_N^0 , в пределе $t \rightarrow \infty$ обязательно опережает критический размер $g_*(t)$, иначе весь спектр перешел бы в испаряющуюся часть с $v(g) < 0$, что противоречит финальному выпадению всего избытка вещества в конденсат.

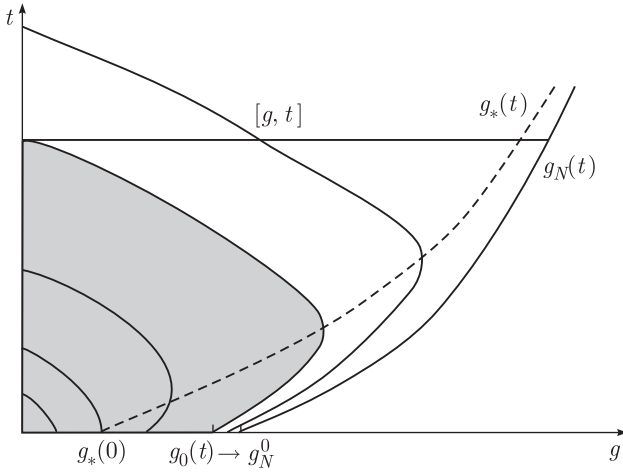


Рис. 2.4. Поведение характеристик в асимптотической стадии

2. Поскольку счетная концентрация капель $N(t)$ при развитой конденсации должна стремиться к нулю, то точка $g_0(t)$ должна стремиться к границе начального спектра g_N^0 . Стремление $g_0(t) \rightarrow a < g_N^0$ привело бы к неверной асимптотике $N \rightarrow \text{const} > 0$, поскольку веса модельных частиц в соответствии с (4.2) сохраняются до тех пор, пока модельная частица не придет в начало координат и не погибнет. Тем самым существенная для момента $t \rightarrow \infty$ область начального спектра $[g_0(t), g_N^0]$ в пределе $t \rightarrow \infty$ имеет нулевые размеры.

Перечисленные особенности позволяют сделать вывод, что любая модельная частица, выходящая из фиксированной точки в области определения начального спектра, обязательно придет в начало координат; следовательно, никакое начальное разбиение области $0 \leq g \leq g_N^0$ не позволит правильно описать асимптотическое поведение спектра при использовании метода частиц. Фактически об этом уже говорилось в разд. 2.6, когда отмечалось, что автомодельные распределения полностью определяются поведением начального спектра в окрестности граничной точки g_N^0 .

Для того, чтобы добиться правильного численного описания спектров в асимптотической стадии, будем рассматривать уравнение (2.8) на отрезке $[0, g_N(t)]$ и согласуем поведение всей сетки с движением граничной точки (Пискунов, 1984):

$$g_n(t) = \frac{n-1}{L-1} g_N(t), \quad n = 1, \dots, L, \quad d_t g_N(t) = v(g_N, t), \quad (2.71)$$

где L — число точек разбиения. Данная сетка практически не связана с каким-либо начальным разбиением, и она автоматически

делит на равные отрезки всю существенную на данный момент времени t область определения спектра, причем граничная точка $g_N(t)$ стремится к бесконечности, обгоняя критический размер $g_*(t)$. Для того, чтобы описать поведение концентраций $f(g, t)$, проинтегрируем уравнение (2.8) в пределах от $g_{n-1}(t)$ до $g_n(t)$. Путем аппроксимации возникающих интегралов значениями $f(g, t)$ и $g(t)$ в узловых точках легко получить систему дифференциальных уравнений для величин $f_n(t) = f(g_n, t)$ (Пискунов, 1984). Численное решение этих уравнений для различных начальных условий показало, что метод обладает высокой точностью воспроизведения асимптотических спектров при $L = 50$. Расчеты обнаружили также, что автомодельные распределения, реализующиеся для самых различных начальных условий, устойчивы в своем классе возмущений, следовательно, они могут рассматриваться на практике наряду с известным распределением Лифшица–Слезова (2.70).

Глава 3

КИНЕТИКА ПРОЦЕССОВ КОАГУЛЯЦИИ

В снегу кипит большая драка.
Как легкий бог летит собака.
Мальчишка бьет врага в живот.
На елке тетерев живет.
Уж ледяные свищут бомбы.
Уж вечер. В зареве снега.
В сугробах роя катакомбы,
Мальчишки лезут на врага.

Н. Заболоцкий. Игра в снежки

Одним из наиболее важных процессов, определяющих дальнейшее изменение спектров частиц дисперсной фазы, является коагуляция, т. е. процесс слияния частиц в результате их столкновений. Частицы, имеющие в своем составе свыше 10^3 – 10^4 молекул, уже обладают столь значительным ван-дер-ваальсовым притяжением, что при столкновениях происходит слияние частиц (Левич, 1959). Механизм столкновений определяется термодинамическими и газодинамическими условиями в среде-носителе. Среди наиболее часто встречающихся механизмов такого рода можно назвать (Левич, 1959; Мейсон, 1961; Фукс, 1961; Hidy and Brock, 1970; Волощук, Седунов, 1975; Мазин, Шметер, 1983; Пискунов, 1991): коагуляцию в результате броуновского движения частиц (броуновская коагуляция); коагуляцию в турбулентных пульсациях газовой среды; коагуляцию в ламинарном потоке с поперечным градиентом скорости (градиентная коагуляция); коагуляцию частиц при их движении в силовом поле Земли (гравитационная коагуляция) и т. д.

Коагуляция решающим образом влияет на процессы формирования и выпадения атмосферных осадков, определяет динамику изменения спектров частиц при естественных, промышленных и аварийных выбросах аэрозольных примесей в атмосферу. За счет этого механизма сильно меняется спектр капель в облаках и дисперсный состав

частиц в непосредственной близости к источникам выброса, поскольку концентрация частиц велика и парные столкновения происходят достаточно часто. Коагуляция важна также для сравнительно медленных процессов формирования аэрозольной компоненты земной атмосферы и эволюции спектров аэрозольных примесей при переносе выбросов на большие расстояния. В целом моделирование кинетики коагуляции представляет интерес для многих задач механики и физики дисперсных систем (Левич, 1959; Мейсон, 1961; Фукс, 1961; Юнге, 1965; Hidy and Broek, 1970; Волощук, Седунов, 1975; Пискунов, 1991).

Описываются процессы коагуляции нелинейным кинетическим уравнением, сходным по своей структуре с уравнением Больцмана. Задача решения этого уравнения не проста и последние результаты в этой области показывают, что без предварительного анализа основных качественных закономерностей протекания процессов коагуляции, требующего привлечения содержательных идей из смежных областей физики, далеко продвинуться не удастся. В особенности это относится к изучению асимптотической стадии и критических явлений. Важным стимулом к развитию теории коагуляции послужила возможность создания численных методов решения и их реализация на быстродействующих ЭВМ. По сути дела, численные методы позволяют изучать кинетику коагуляции на уровне численного эксперимента. Однако применение численного подхода предполагает, что в распоряжении исследователя имеются содержательные модели реальных процессов формирования частиц, которые включают в себя не только коагуляцию, но и другие сопутствующие ей факторы. Это обстоятельство требует формулировки и анализа решений усложненных вариантов кинетического уравнения коагуляции, включающего в себя конденсацию, дробление, направленное движение, осаждение и источники частиц. В последнее время на этом пути достигнуты определенные успехи. В целом постоянно растущее число публикаций и их качество свидетельствуют о формировании отдельного раздела физической кинетики — кинетической теории коагуляции, что удачно отражено в одной из монографий по проблемам решения кинетического уравнения коагуляции (Волощук, 1984).

3.1. Формулировка кинетического уравнения коагуляции

Наиболее просто кинетическое уравнение формулируется для свободных, пространственно однородных систем, когда коагулирующий объем изолирован от побочных процессов, а частицы равномерно распределены по объему. Будем считать, что система достаточно разрежена и слияние происходит только за счет парных столкновений, определяемых частотой слияния $K(g, n)$ частиц с массами g и n в единице объема (обычно величины $K(g, n)$ называют коэффициентами или ядрами коагуляции). Изменение спектра $C(g, t)$ со временем определяется

уравнением Смолуховского

$$\frac{\partial C(g, t)}{\partial t} = S(C; g, t) \equiv \frac{1}{2} \int_0^g K(g-s, s) \times \\ \times C(g-s, t) C(s, t) ds - C(g, t) \int_0^\infty K(g, s) C(s, t) ds. \quad (3.1)$$

Первый член в операторе S определяет прирост концентраций за счет слияний частиц с суммарной массой g , а второй — убыль за счет слияния частиц g со всеми остальными. Задание начального спектра $C(g, 0)$ завершает постановку задачи. Из (3.1) легко определить поведение интегральных моментов функции распределения $L_\alpha(t)$:

$$\frac{dL_\alpha(t)}{dt} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \left[(g+s)^\alpha - g^\alpha - s^\alpha \right] K(g, s) C(g, t) C(s, t) dg ds; \\ L_\alpha(t) = \int_0^\infty g^\alpha C(g, t) dg; \quad \frac{dL_1(t)}{dt} \equiv \frac{dM(t)}{dt} = 0; \quad (3.2) \\ \frac{dL_0(t)}{dt} \equiv \frac{dN(t)}{dt} = -\frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty K(g, s) C(g, t) C(s, t) dg ds.$$

Видно, что для свободных пространственно однородных коагулирующих систем массовая концентрация $M = L_1$ сохраняется, а счетная $N(t) = L_0(t)$ — монотонно убывает со временем; средняя масса частиц $\bar{g}(t) = M/N(t)$ при этом стремится к бесконечности. Таким образом, сам по себе процесс коагуляции приводит к необратимому росту размеров и уменьшению числа частиц.

Уравнение (3.1) аналогично по своей структуре уравнению Больцмана в кинетической теории газов (Исихара, 1973): это также билинейное интегродифференциальное уравнение, в котором роль σv играет K . Однако финал этих уравнений различен: в первом случае — «вымирание» спектра, во втором — стремление к распределению Максвелла.

Величины g, t, C, K далее удобно выбрать безразмерными. Для этого, исходя из вида начального спектра, выбирается характерная масса g_0 (в дискретном варианте это масса мономера) и производится переход к относительным величинам g/g_0 . Замена $C(g, t) \rightarrow C(g, t)/g_0 V_0$ осуществляет переход к безразмерным концентрациям, причем единица объема V_0 может быть выбрана произвольно. И, наконец, выделение размерного множителя K_0 перед коэффициентами коагуляции позволяет перейти к безразмерному времени $K_0 t/V_0$ и найти безразмерную часть ядра $K(g, n)$. Значение V_0 можно выбрать таким, чтобы инте-

гральные характеристики спектра были порядка единицы, например $V_0 = g_0/M$, где M — массовая концентрация в размерных единицах.

В дискретном варианте кинетического уравнения массы частиц считаются кратными массе g_0 некоего мономера $C(g, t) = \sum_{k=1}^{\infty} C_k(t) \delta(g - kg_0)$, что превращает (3.1) в систему связанных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dC_g(t)}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{g-1} K(g-n, n) C_{g-n}(t) C_n(t) - C_g(t) \sum_{n=1}^{\infty} K(g, n) C_n(t). \quad (3.3)$$

Первая формулировка кинетического уравнения коагуляции была предложена Смолуховским в знаменитой работе (Smoluchowsky, 1916) именно в дискретном варианте (3.3), а непрерывная форма записи (3.1) появилась позднее.

Более сложные варианты кинетического уравнения коагуляции связаны с учетом направленного движения частиц в среде-носителе, источников и стоков частиц, процессов дробления и конденсации (Пискунов, 1987, 1991). Так, например, с учетом конденсационных процессов

$$\partial_t C(g, t) + \partial_g [v_g C(g, t)] = S(C; g, t). \quad (3.4)$$

В случае направленного движения частиц со скоростями $\mathbf{u}(g, \mathbf{x}, t)$

$$\partial_t C(g, \mathbf{x}, t) + \operatorname{div} [\mathbf{u} C(g, \mathbf{x}, t)] = S(C; g, \mathbf{x}, t). \quad (3.5)$$

В частности, уравнение (3.5) описывает коагуляцию частиц, движущихся в силовом поле, например, оседающих в поле тяжести. Если поле направлено по оси z , то в стационарном режиме

$$\partial_z [u(g, z) C(g, z)] = S(C; g, z). \quad (3.6)$$

Введением потоков $j(g, z) = u(g, z) C(g, z)$ и модифицированных коэффициентов коагуляции $\tilde{K}(g, n, z) = K(g, n)/u(g, z) u(n, z)$ уравнение (3.6) приводится к виду, аналогичному (3.1), где роль времени играет теперь пространственная координата z . Данный подход использован в работе (Лушников, Пискунов, 1976а) для исследования гравитационной коагуляции капель, выпадающих из облака. Коагуляция в системах с источниками, дроблением и стоками более подробно будет рассмотрена в следующих разделах.

Уравнение (3.1) описывает процесс коагуляции в терминах средних величин $C(g, t)$. В ряде случаев необходимо решение более полной и сложной задачи по изучению кинетики процесса в вероятностной (стохастической) формулировке (Marcus, 1968; Лушников, 1978). Для этого возьмем конечный объем V , который пространственно однородно

заполнен частицами с суммарной массой M . Будем характеризовать каждое состояние в системе Q числами заполнения $n_g(Q)$, означающими количество частиц массой g в данном состоянии:

$$Q = \{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_m, \dots, n_g, \dots, n_M\}; \quad \sum_{g=1}^M g n_g(Q) = M. \quad (3.7)$$

При слиянии частиц k и m система переходит из состояния Q в Q^+ :

$$Q^+ = \{n_1, n_2, \dots, n_k - 1, \dots, n_m - 1, \dots, n_g + 1, \dots, n_M\}; \quad (3.8)$$

$$g = k + m.$$

Определим также состояние Q^- из равенства $(Q^-)^+ = Q$ и зададим скорость переходов из Q^- в Q функцией $A(Q^-, Q)$. Тогда вероятность $W(Q, t)$ заставить систему в момент времени t в состоянии Q подчиняется уравнению (Лушников, 1978)

$$\frac{dW(Q, t)}{dt} = \sum_{Q^-} A(Q^-, Q) W(Q^-, t) - W(Q, t) \sum_{Q^+} A(Q, Q^+). \quad (3.9)$$

Необходимо задать начальное условие $W(Q, 0) = W_0(Q)$. Нормировка $\sum_Q W(Q, t) = 1$ должна выполняться автоматически. Скорость переходов $A(Q^-, Q)$ находится из комбинаторных соображений:

$$A(Q^-, Q) = V^{-1} K(k, m) n_k(Q^-) \frac{n_m(Q^-) - \delta_{k,m}}{1 + \delta_{k,m}}. \quad (3.10)$$

Уравнение (3.9) аналогично уравнению Паули в статистической физике (Исихара, 1973). Главная трудность его решения заключается в огромном числе возможных состояний $p(M)$ при больших M :

$$p(M) = \frac{1}{4M\sqrt{3}} \exp\left(\pi\sqrt{\frac{2M}{3}}\right). \quad (3.11)$$

Так, например, для $M = 100$ $p(M) = 2 \cdot 10^8$, а для того, чтобы перейти к термодинамическому пределу $M, V \rightarrow \infty, M/V = \text{const}$, требуются значения $M \sim 10^3 - 10^4$. Чтобы избавиться от этой трудности, было предложено (Домиловский и др., 1978, 1979) прямое моделирование марковского вероятностного процесса (3.9) методом Монте-Карло. Процедура розыгрыша автоматически отбирает наиболее вероятные траектории, дающие существенный вклад в поведение средних величин и их дисперсий.

Связь вероятностной формулировки с уравнением Смолуховского (3.1) должна устанавливаться в термодинамическом пределе. Аналогом концентраций $C(g, t)$ служат при этом величины

$$C(g, t) = \frac{\bar{n}_g(t)}{V}; \quad \bar{n}_g(t) = \sum_Q n_g(Q) W(Q, t). \quad (3.12)$$

Процедура усреднения уравнений (3.9) приводит к следующему результату (Лушников, 1978):

$$V d_t \bar{n}_g = \frac{1}{2} \sum_{k+m=g} K(k, m) (\overline{n_k n_m} - \bar{n}_k \bar{n}_m) - \sum_m K(g, m) (\overline{n_g n_m} - \bar{n}_g \bar{n}_m). \quad (3.13)$$

Это уравнение совпадает с дискретным вариантом (3.1), если пренебречь членами $\bar{n}_m/V^2$ и предположить, что $\overline{n_k n_m} = \bar{n}_k \bar{n}_m$. Однако общего рецепта, когда такая замена правомочна, а когда нет, в настоящее время не найдено.

3.2. Коэффициенты коагуляции

Кинетика процессов коагуляции существенным образом зависит от конкретного вида ядра $K(g, n)$. Физический смысл величины $K(g, n)$ прост — это частота столкновений двух частиц с массами g и n в единичном объеме. В размерных единицах $[K] = \text{см}^3/\text{с}$. По своему смыслу $K(g, n)$ должны быть симметричными и неотрицательными функциями своих аргументов. Очень важный класс представляют собой однородные ядра

$$K(ag, an) = a^\lambda K(g, n), \quad (3.14)$$

где a — произвольное число; λ — параметр однородности. Приведем некоторые упрощенные зависимости $K(g, n)$ для практически важных механизмов коагуляции.

Броуновская коагуляция частиц. Столкновения происходят в результате хаотического блуждания частиц, находящихся в среде с некоторой средней температурой T . В диффузионном режиме размер частиц гораздо больше, чем их пробег в среде. Для определения K сначала из уравнения диффузии находят поток на некоторую выделенную сферу, а затем учитывают движение самой сферы. В результате получается формула (Чандрасекар, 1947; Левич, 1959; Фукс, 1961; Hidy and Brock, 1970; Грин, Лейн, 1972; Волощук, Седунов, 1975)

$$K(r_1, r_2) = 4\pi(r_1 + r_2)(D_1 + D_2),$$

где r_i — радиусы частиц, D_i — их коэффициенты броуновской диффузии; η — вязкость среды. Если пренебречь поправкой Каннингема, то $D_i = kT/6\pi\eta r_i$ и в безразмерном виде

$$K(g, n) = (g^{1/3} + n^{1/3})(g^{-1/3} + n^{-1/3}), \quad \lambda = 0. \quad (3.15)$$

Константа $K_0 = K(r_0, r_0) = 8kT/3\eta$. Для броуновской коагуляции в свободномолекулярном режиме частицы движутся независимо от среды и имеют максвелловское распределение по скоростям $f(\mathbf{v})$. Усредняя величину $\pi(r_1 + r_2)^2 |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|$ по $f(\mathbf{v}_1)$, $f(\mathbf{v}_2)$, получаем

$$K(r_1, r_2) = \sqrt{\frac{6kT}{\rho_p}} (r_1^{-3} + r_2^{-3})^{1/2} (r_1 + r_2)^2,$$

где ρ_p — плотность частиц. В этом случае $K_0 = K(r_0, r_0) = 8\sqrt{\frac{3kTr_0}{\rho_p}}$, где r_0 — радиус мономера, а безразмерное ядро имеет вид

$$K(g, n) = (g^{-1} + n^{-1})^{1/2} (g^{1/3} + n^{1/3})^2, \quad \lambda = 1/6. \quad (3.16)$$

Гравитационная коагуляция происходит в результате столкновений частиц, падающих в поле тяжести с различными скоростями u_g , зависящими от размеров частиц. Безразмерное ядро

$$K(g, n) = (g^{1/3} + n^{1/3})^2 |u_g(g) - u_g(n)| \theta(g, n),$$

где θ — коэффициент захвата. В стоксовом режиме падения $u_g(g) \sim g^{2/3}$ и для единичного коэффициента захвата θ

$$K(g, n) = (g^{1/3} + n^{1/3})^2 |g^{2/3} - n^{2/3}|, \quad \lambda = 4/3. \quad (3.17)$$

Для крупных частиц, которые движутся в турбулентном режиме обтекания, $u_g(g) \sim g^{1/6}$, следовательно,

$$K(g, n) = (g^{1/3} + n^{1/3})^2 |g^{1/6} - n^{1/6}|, \quad \lambda = 5/6. \quad (3.18)$$

Коагуляция в атмосферных турбулентных пульсациях рассмотрена в работах (Saffman and Turner, 1956; Пискунов и др., 1996); различного рода аппроксимационные выражения для K приведены в работе (Мазин, Шметер, 1983).

Градиентная коагуляция. Частицы движутся в ламинарном потоке с поперечным градиентом скорости (например, течение вязкой жидкости у стенки или в трубе) и полностью увлекаются течением. Столкновения происходят за счет разницы скоростей частиц, находящихся

на различном расстоянии от стенки. Если считать градиент скорости в пределах суммарного радиуса частиц постоянным и пренебречь эффектами обтекания, то безразмерное ядро имеет вид

$$K(g, n) = (g^{1/3} + n^{1/3})^3, \quad \lambda = 1. \quad (3.19)$$

В порошковой металлургии и химической промышленности часто имеет место процесс миграции и слияния металлических кристалликов на нагретой подложке (старение металлических катализаторов). В этом случае (Ruckenstein and Pulvermacher, 1973)

$$K(g, n) = g^\lambda + n^\lambda, \quad -2/3 < \lambda < 2/3. \quad (3.20)$$

Значение λ определяется температурой подложки и другими внешними условиями. Для режима спекания $\lambda = -2/3$, в диффузионном режиме $\lambda = 2/3$.

При коалесценции газовых пузырьков в твердом теле слияние происходит с сохранением суммарной поверхности пузырьков и, следовательно, с увеличением их объема. Это вызывает распухание деформируемых материалов в ядерных реакторах — «свеллинг» (Гегузин, Кривоглаз, 1971). Соответствующие коэффициенты коагуляции приведены в работе (Barroudy, 1967).

Большое значение для теоретического анализа имеют модельные зависимости $K(g, n)$, наиболее общей из которых является следующая (α -, β -модель):

$$K(g, n) = g^\alpha n^\beta + n^\alpha g^\beta; \quad \lambda = \alpha + \beta. \quad (3.21)$$

В целом определение коэффициентов коагуляции для различных механизмов столкновений является самостоятельной и далеко не простой задачей, требующей проведения тонких экспериментов и теоретических исследований со сложными гидродинамическими расчетами, учетом процессов диффузии частиц в многокомпонентных средах и т. д. В реальных условиях может происходить смена механизмов и реализация промежуточных режимов, когда коагуляция идет за счет нескольких выделенных выше процессов.

3.3. Способы аналитического решения уравнения Смолуховского

Аналитические решения кинетического уравнения возможны для ядер

$$K_c = 2, \quad \lambda = 0; \quad K_+ = g + n, \quad \lambda = 1; \quad K_* = 2gn, \quad \lambda = 2. \quad (3.22)$$

В непрерывном варианте (3.1) для получения таких решений используют преобразование Лапласа, разнообразные примеры применения которого проиллюстрированы в монографии (Волощук, 1984). При

решении дискретного варианта кинетического уравнения (3.3) вводится производящая функция $F(z, t)$ со следующими свойствами:

$$F(z, t) = \sum_{g=1}^{\infty} C_g(t) z^g; \quad F(1, t) = N(t); \quad z \partial_z F|_{z=1} = M. \quad (3.23)$$

Уравнение для $F(z, t)$ получается умножением (3.3) на z^g и суммированием по g от 1 до ∞ . Если получено явное выражение для $F(z, t)$, то концентрации $C_g(t)$ находятся разложением в ряд по z . Оказывается, что аналитические особенности $F(z, t)$ как функции комплексного переменного z достаточно просто связаны с асимптотическим поведением спектра $C_g(t)$. Так, например, тип особенности определяет степенное поведение «хвоста» спектра, а положение особой точки — показатели экспоненциального затухания. Приход особой точки за конечное время в $z = 1$ свидетельствует о критических явлениях в коагулирующей системе (см., например, разд. 3.5, где подробно проанализировано поведение спектров для ядра K_*).

Проиллюстрируем использование метода производящих функций для решения кинетического уравнения (3.3) на примере ядра K_c . В этом случае уравнение для F имеет вид

$$\partial_t F = F^2 - 2FN; \quad d_t N = -N^2; \quad \partial_t U = U^2,$$

где введена функция $U = F - N$. Если начальные условия монодисперсные, т. е. $C_g(0) = \delta_{g,1}$, то $U|_{t=0} = z - 1$, следовательно, $U(z, t) = (z - 1)/[1 + (1 - z)t]$. Таким образом, $F(z, t) = z/[(1 + t)(1 + t - zt)]$. Разлагая $F(z, t)$ в ряд, получаем известное решение, найденное Смолуховским (Smoluchowsky, 1916):

$$C_g(t) = \frac{t^{g-1}}{(1+t)^{g+1}} = N^2(t) z_0^{1-g}; \quad N(t) = (1+t)^{-1}; \quad z_0(t) = \frac{(1+t)}{t}. \quad (3.24)$$

Особенность $F(z, t)$ — полюс в точке $z_0(t)$. С течением времени $z_0(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 1$. При больших временах $t \gg 1$

$$N(t) \approx t^{-1}; \quad C(g, t) \approx N^2(t) \exp[-gN(t)]. \quad (3.25)$$

Оказывается, что такая же асимптотика справедлива при $M = 1$ для любых начальных условий. Например, из уравнения для $N(t)$ следует, что $N(t)^{-1} - N_0^{-1} = t$, т. е. $N(t) \approx t^{-1}$ для любых начальных значений $N_0 = N(0)$. В свое время этот факт послужил отправной точкой для формулировки гипотезы автомодельности в теории коагуляции (Schuman, 1940; Тодес, 1949).

Для ядра K_+ уравнение, определяющее F , имеет вид

$$\partial_t F = z(F - N)\partial_z F - MF; \quad d_t N = -MN; \quad \partial_t U = zU\partial_z U - MU,$$

где по-прежнему использована функция $U = F - N$. Ясно, что $N(t) = N_0 e^{-Mt}$. Уравнение для U решается методом характеристик (Карташев, Рождественский, 1976). Если начальные условия монодисперсные ($C_g(0) = \delta_{g,1}$; $M = N_0 = 1$), то $N(t) = e^{-t}$, а соответствующее решение имеет вид $F(z, t) = N(t)\tau(z, t)$, где функция τ находится из трансцендентного уравнения

$$z = \tau(z, t) \exp\{\alpha(t)[1 - \tau(z, t)]\}; \quad \alpha(t) = 1 - N(t). \quad (3.26)$$

Разложение $\tau(z, t)$ по z находится в этом случае с помощью ряда Бурмана–Лагранжа (Лаврентьев, Шабат, 1973), что приводит к следующему выражению для спектра:

$$C_g(t) = N(t) \frac{[\alpha(t)g]^{g-1}}{g!} \exp[-g\alpha(t)] = N(t) \exp[-\alpha(t)] \frac{(e^{-1}g)^{g-1}}{g!} z_0^{1-g};$$

$$z_0(t) = \alpha^{-1}(t) \exp[\alpha(t) - 1]. \quad (3.27)$$

В точке $z_0(t)$ функция $F(z, t)$ имеет корневую особенность. С течением времени $z_0(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 1$. При больших временах $t \gg 1$ асимптотика (3.27) следующая:

$$C(g, t) \approx N^4(t) \Psi[gN^2(t)]; \quad \Psi(x) = \frac{\exp(-x/2)}{x\sqrt{2\pi x}}. \quad (3.28)$$

Отметим, что функция $\Psi(x)$ сингулярна в начале координат. Оказывается, что аналогичная асимптотика справедлива для ядра K_+ при любых начальных условиях. В частности, она выполняется для решений непрерывного варианта кинетического уравнения (3.1) с ядром K_+ , полученных для начальных спектров в виде экспонент (Сафронов, 1962; Головин, 1963) и для гамма-распределений $C(g, 0) = Ag^\gamma e^{-\alpha g}$ (Scott, 1968). При этом окончательный ответ зависит не только от сохраняющегося значения массовой концентрации M , но и от стартовых значений счетной концентрации $N(0)$ и второго момента $L_2(0)$.

Асимптотические распределения (3.25) и (3.28) для ядер K_* , K_+ резко различаются между собой как по комбинации величин g и $N(t)$ в новой независимой переменной x , так и по поведению универсальной функции $\Psi(x)$ в начале координат. Причина этого различия будет выяснена в следующем разделе, посвященном применению автомодельных распределений в теории коагуляции. Анализ решений для ядра K_* , детали которого мы отложим до обсуждения критических явлений при коагуляции, показывает, что процесс протекает в этом случае совершенно необычным образом. Быстрый рост ядра, характеризуемый значением параметра $\lambda = 2$, приводит в конечный момент времени к формальному нарушению баланса масс в системе, который удается объяснить только с помощью введения аномальных частиц, не описываемых уравнением Смолуховского.

В заключение получим одно из решений более сложного кинетического уравнения (3.4), описывающего совместное действие коагуляции и конденсации. Возьмем постоянное ядро коагуляции $K_c = 2$ и линейную по массе частиц скорость конденсации $v_g = \beta g$. Кинетическое уравнение (3.4) выглядит в этом случае следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(g, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial g} [\beta g C(g, t)] = \\ = \int_0^g C(g-n, t) C(n) dn - 2C(g, t) \int_0^\infty C(n, t) dn. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Легко проверить, что счетная концентрация $N(t)$ ведет себя так же, как и в случае без конденсации, а массовая $M(t)$ — экспоненциально растет за счет постоянного перехода пара в конденсат (либо экспоненциально убывает при $\beta < 0$, т. е. при испарении):

$$N(t) = \frac{N_0}{1 + N_0 t}; \quad M(t) = M_0 \exp(\beta t). \quad (3.30)$$

Вводя преобразование Лапласа $\tilde{C}(p, t) = \int_0^\infty e^{-pg} C(g, t) dg$ и функцию

$U(p, t) = N(t) - \tilde{C}(p, t)$, получаем уравнение для U :

$$\partial_t U - \beta p \partial_p U = -U^2. \quad (3.31)$$

Это квазилинейное уравнение решается методом характеристик (Карташев, Рождественский, 1976) и сводится к системе уравнений:

$$d_t p = -\beta p(t); \quad p(0) = \tau; \quad d_t U = -U^2(t); \quad U(0) = U_0(\tau), \quad (3.32)$$

где $U_0(\tau)$ — значение функции $U(p, t)$ при $t = 0$, а τ — параметр. Напомним, что нам придется обращаться преобразование Лапласа, поэтому многое зависит от того, удастся ли получить достаточно простое выражение для $U(p, t)$ после исключения параметра τ . Сделать это удастся только для простых начальных зависимостей $U_0(\tau)$. Предположим, например, что начальное распределение для функции $C(g, t)$ имеет экспоненциальный вид: $C(g, 0) = a \exp(-\alpha g)$; $N_0 = a/\alpha$; $M_0 = a/\alpha^2$. Тогда $U_0(\tau) = \frac{a\tau}{\alpha(\alpha + \tau)}$ и после некоторых выкладок получаем решение уравнений (3.31), (3.32), (3.29), которое наиболее компактно записывается в терминах интегральных величин:

$$\begin{aligned} U(p, t) = \frac{N(t)M(t)p}{N(t) + M(t)p}; \quad \tilde{C}(p, t) = \frac{N^2(t)}{N(t) + M(t)p}; \\ C(g, t) = \frac{N^2(t)}{M(t)} \exp \left[-g \frac{N(t)}{M(t)} \right]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Асимптотика спектров подобна формуле (3.25) для свободной коагуляции с ядром K_c , поскольку в (3.25) конкретное значение $M = 1$. Существенным отличием (3.33) от (3.25) является экспоненциальное возрастание (убывание) массовой концентрации капель, обусловленное массообменом между паром и каплями.

Кроме того, можно восстановить поведение интегральных величин для ядра коагуляции $K(g, n) = (g + n)K_0$ и скорости конденсации $v_g = \beta g$:

$$N(t) = N_0 \exp \left[-\frac{K_0 M_0}{\beta} (e^{\beta t} - 1) \right]; \quad M(t) = M_0 \exp(\beta t). \quad (3.34)$$

Формулы (3.33), (3.34) полезны для калибровки численных методов, моделирующих совместное действие процессов коагуляции и конденсации.

Таким образом, аналитические решения кинетического уравнения коагуляции для модельных ядер (3.22) дают достаточно разнообразные варианты поведения процесса и оказываются очень полезными для выяснения общих закономерностей поведения спектров частиц в коагулирующих системах. Кроме того, эти решения могут служить для проверки и калибровки расчетных методик, а также помогают ориентироваться в реальных случаях. Примеры аналитических решений для других вариантов кинетического уравнения, описывающих совместное действие коагуляции с источниками, дроблением и стоками частиц, будут приведены в соответствующих разделах.

3.4. Автомоделльные асимптотические решения

Поведение решений кинетического уравнения в асимптотической стадии (при $t \gg 1$) представляет особый интерес. Это практически важная задача, которая не всегда поддается прямому численному решению из-за сильного уширения коагуляционного спектра и смещения его в область больших размеров. С другой стороны, интуитивно ясно, что при больших временах решение должно «забывать» детали начального распределения, запоминая лишь некоторые интегральные характеристики, иначе процесс коагуляции был бы неустойчивым относительно возмущений начального спектра. Факт устойчивого поведения решений при больших временах является общим свойством нелинейных систем и тесно связан с инвариантностью нелинейных процессов относительно масштабных преобразований.

Впервые группа масштабных преобразований для кинетического уравнения (3.1) с однородными коэффициентами коагуляции (3.14) была найдена в работе (Лушников, 1973)

$$C(g, t) \rightarrow a^2 C(ag, a^{1-\lambda}t), \quad \lambda < 1. \quad (3.35)$$

Существенно, что преобразование (3.35) не меняет сохраняющуюся величину M . Если начальный спектр при больших t не важен, то из единственности решения получаем

$$C(g/a, t) = a^2 C(g, a^{1-\lambda}t). \quad (3.36)$$

Взяв $a = 1 + \varepsilon$, где $\varepsilon \rightarrow 0$, получим из (3.36) дифференциальное уравнение

$$g\partial_g C + (1 - \lambda)t\partial_t C + 2C = 0. \quad (3.37)$$

Общее решение, удовлетворяющее инвариантности спектров относительно масштабных преобразований (3.36), (3.37), следующее:

$$C(g, t) = g_a^{-2}(t) \Psi(x), \quad x = \frac{g}{g_a(t)}, \quad g_a(t) \sim t^{1/(1-\lambda)}, \quad \lambda < 1, \quad (3.38)$$

где $g_a(t)$ — масштаб подобия, определяющий растяжение по оси g . В целом спектр меняется подобным образом и одновременно проседает $\sim g_a^{-2}(t)$, чтобы обеспечить закон сохранения M . Из (3.38) легко найти асимптотическое поведение моментов $L_\alpha(t)$ (все интегралы предполагаются сходящимися):

$$L_\alpha(t) \equiv \int_0^\infty g^\alpha C(g, t) dg = B_\alpha t^{(\alpha-1)/(1-\lambda)}; \quad B_\alpha = \int_0^\infty x^\alpha \Psi(x) dx. \quad (3.39)$$

В частности, $N(t) = L_0(t) = B_0 t^{-1/(1-\lambda)}$, т.е. $g_a(t) \sim N^{-1}(t) \sim \bar{g}(t)$ и поведение масштаба подобия совпадает с поведением средней массы частиц. Функция $\Psi(x)$ в (3.38) подчиняется уравнению

$$2\Psi + x d_x \Psi = -(1 - \lambda) S(\Psi; x); \quad \int_0^\infty x \Psi(x) dx = M. \quad (3.40)$$

Автомодельной зависимости (3.38) можно придать другой, эквивалентный вид (гипотеза самосохранения Фридландера (Friedlander, 1960):

$$C(g, t) = \frac{N^2(t)}{M} f(x); \quad x = \frac{gN(t)}{M}; \quad \int_0^\infty x f(x) dx = \int_0^\infty f(x) dx = 1; \quad (3.41)$$

$$-p \left[f(x) + \frac{x d_x f}{2} \right] = S(f; x); \quad p = \int_0^\infty \int_0^\infty K(x, y) f(x) f(y) dx dy. \quad (3.42)$$

Простым примером самосохраняющегося автомодельного распределения (3.41) является аналитически полученное решение (3.25) для ядра $K_c = 2$. Легко проверить, что в этом случае функция $\Psi(x) = e^{-x}$

удовлетворяет как уравнению (3.40), так и (3.42). С использованием гипотезы самосохранения в работах (Friedlander and Wang, 1966; Lai et al., 1972) численно найдены автомодельные распределения для практически важных механизмов броуновской коагуляции в непрерывном (3.15) и свободномолекулярном (3.16) режимах.

Итак, при $\lambda < 1$ во многих случаях асимптотическое поведение решений описывается формулами (3.38), (3.41) с функциями $\Psi(x)$, $f(x)$, удовлетворяющими уравнениям (3.40), (3.42). В ходе рассмотрения требовалась сходимость $\int_0^\infty f(x) dx$. При этом поведение масштаба

подобия совпадает с поведением средней массы (объема) частиц.

Более тщательный анализ, проведенный в работе (Лушников, Пискунов, 1976б), показал, что запись решений в виде (3.38) является более общей, а гипотеза Фридландера (3.41), (3.42) нарушается для ядер, обладающих совокупностью свойств

$$K(1, x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} \text{const}; \quad K(1, x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \infty. \quad (3.43)$$

При этом с наибольшей скоростью идут процессы слияния с участием крупных частиц, следовательно, начальная часть спектра убывает медленнее, чем концентрации частиц со средней массой $\bar{g}$ и масштабом подобия g_a . Это приводит в конечном счете к сингулярности $\Psi(x)$ в начале координат:

$$\Psi(x) = \varphi(x)/x^\gamma, \quad \varphi(0) \neq 0, \quad 1 < \gamma < 2, \quad (3.44)$$

и расходимости интеграла $\int_0^\infty \Psi(x) dx$ (см., например, аналитически

полученную асимптотику (3.28) для ядра K_+). Результирующий спектр сильно полидисперсен, причем средняя масса частиц $\bar{g}(t) \sim t^{(2-\gamma)/(1-\lambda)}$ растет медленнее, чем масштаб подобия $g_a(t) \sim t^{1/(1-\lambda)}$. Естественно, что связь (3.38) спектров с автомодельной функцией $\Psi(x)$ имеет место не для всех значений g , иначе расходился бы интеграл для

$$N(t) = \int_0^\infty C(g, t) dg. \quad \text{Следовательно, существует интервал } 0 \leq g \leq a,$$

внутри которого никогда нет выхода на автомодельный режим, а связь (3.38) справедлива лишь при $g > a$. Из-за сингулярностей уравнение (3.40) для автомодельной функции требует модификации. Для этого представим спектр в виде, обобщающем (3.38) на случай $\lambda = 1$,

$$C(g, t)|_{t \gg 1} \approx MB^2(t)\Psi(x); \quad x = gB(t); \quad d_t B = -M\chi B^{2-\lambda}, \quad \lambda \leq 1, \quad (3.45)$$

где χ — параметр разделения. Вводя параметр обрезания a в кинетическое уравнение (3.1) и интегрируя дважды по x , получаем уравнение, в котором все особенности сглажены и можно перейти к пределу $\delta = aB(t) \rightarrow 0$ (Лушников, Пискунов, 19766, 1978)

$$\begin{aligned} \chi x \int_x^\infty \Psi(y) dy &= \frac{1}{2} \int_0^x \Omega(x-y, y) dy; \\ \Omega(x, y) &= \int_x^\infty ds \int_y^\infty dt K(s, t) \Psi(s) \Psi(t); \quad \int_0^\infty y \Psi(y) dy = 1. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Уравнение (3.46) справедливо для всех однородных ядер с $\lambda \leq 1$ и применимо как для сингулярных, так и несингулярных $\Psi(x)$. При $\lambda < 1$ $B(t) \sim t^{-1/(1-\lambda)}$, а значение параметра разделения χ не влияет на окончательный ответ и его можно выбрать, например, равным $(1-\lambda)$. При $\lambda = 1$ конкретное значение χ очень существенно, поскольку оно определяет закон убывания $B(t) \sim \exp(-\chi Mt)$ и вид автомодельной переменной в (3.45). Найти значение χ в этом случае можно только из условий самосогласования (Лушников, Пискунов, 1978) после решения всей задачи. Связь между $B(t)$ и счетной концентрацией $N(t)$ определяется степенью сингулярности γ функции $\Psi(x)$ и находится интегрированием (3.44) по x в пределах от $\delta = aB(t)$ до ∞ :

$$B(t) \sim N^{1/(2-\gamma)}(t), \quad \gamma > 1; \quad B(t) \sim N(t), \quad \gamma < 1. \quad (3.47)$$

В качестве иллюстрации универсального характера уравнения (3.46) приведем полученные в работах (Лушников, Пискунов, 19766, 1978) решения уравнения (3.46) для модельных ядер K_c, K_+ из (3.22).

Для этого введем кумулятивные функции $\Phi_\alpha(x) = \int_x^\infty y^\alpha \Psi(y) dy$ и воспользуемся преобразованием Лапласа $\tilde{\Phi}_\alpha(p) = \int_0^\infty e^{-px} \Phi_\alpha(x) dx$. Для

ядра K_c получим из (3.46)

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_0(p) &= \frac{\chi}{p + \chi}; \quad \Phi_0(x) = \chi \exp(-\chi x); \\ \Psi(x) &\equiv -d_x \Phi_0(x) = \chi^2 \exp(-\chi x). \end{aligned} \quad (3.48)$$

Поскольку для этого модельного ядра $N(t)|_{t \gg 1} \approx t^{-1}$, а из (3.45) $B(t)|_{t \gg 1} \approx (M\chi t)^{-1}$, то видно, что параметр χ из ответа выпадает, а асимптотические спектры принимают вид

$$C(g, t)|_{t \gg 1} \approx \frac{N^2(t)}{M} \exp \left[-\frac{gN(t)}{M} \right], \quad (3.49)$$

что полностью отвечает гипотезе самосохранения (3.41) и совпадает при $M = 1$ с полученным ранее аналитическим ответом (3.25). Это пример несингулярного автомодельного распределения.

Для ядра K_+ интегрированием (3.46) по x от 0 до ∞ можно убедиться, что с учетом последнего нормировочного условия значение параметра χ фиксируется и оно равно 2, следовательно, из (3.45) $B(t) = B_0 e^{-2Mt} \sim N^2(t)$. С учетом того, что $xd_x\Phi_0(x) = d_x\Phi_1(x)$, получим, используя преобразование Лапласа, следующее решение (3.46):

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}_0(p) &= \frac{p_0}{p} \left(\sqrt{1 + \frac{2p}{p_0}} - 1 \right); \\ \Psi(x) &\equiv -d_x\Phi_0(x) = \frac{p_0^2}{\sqrt{2\pi}} (p_0x)^{-3/2} \exp\left(-\frac{p_0x}{2}\right),\end{aligned}\tag{3.50}$$

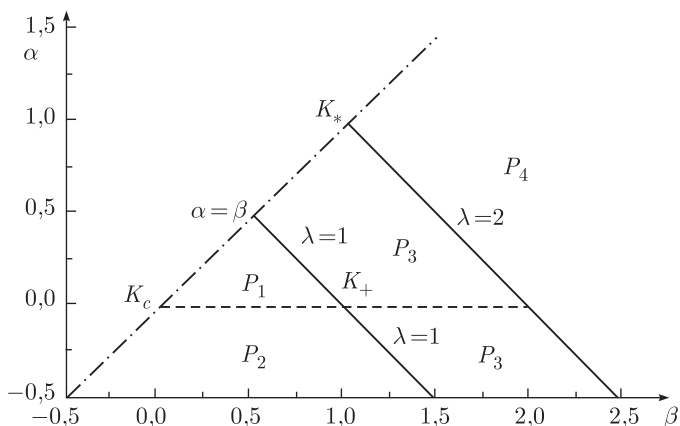
где p_0 — произвольный параметр. Неопределенность в выборе B_0 , p_0 исчезает, если принять во внимание дополнительный закон сохранения, характерный для коагуляции с ядром K_+ : $L_2(t)N^2(t) = A = \text{const}$. Прямое вычисление $L_2(t)$ с использованием явного выражения для $\Psi(x)$ дает $L_2(t) = M/[p_0B(t)]$, следовательно,

$$\begin{aligned}C(g, t)|_{t \gg 1} &\approx MN^4(t) x^{3/2} \sqrt{\frac{M}{2\pi A}} \exp\left(-\frac{Mx}{2A}\right); \\ x &= gN^2(t); \quad A = L_2(0)N^2(0).\end{aligned}\tag{3.51}$$

Эта асимптотика обобщает выражение (3.28). Она была получена в ранних работах (Головин, 1963; Scott, 1968), исходя из аналитических решений кинетического уравнения (3.1) с ядром K_+ , но до появления работ (Лушников, Пискунов, 1976б, 1978), в которых впервые были введены сингулярные автомодельные распределения, она оставалась непонятной.

Для практически важного ядра градиентной коагуляции (3.19) функция $\Psi(x)$ также сингулярна, поскольку поведение ядра характеризуется свойствами (3.43). Аппроксимационное решение уравнения (3.46) найдено в работе (Лушников, Токарь, 1980). Численные решения уравнения (3.46) для ядер (3.20), описывающих старение катализаторов, приведены в работе (Лушников, Пискунов, 1978). Весьма важной является аналогия несингулярных и сингулярных автомодельных распределений в теории коагуляции, отмеченная в работе (Пискунов, 1987), с автомодельными решениями первого и второго рода в газодинамике (Зельдович, Райзер, 1966).

Общий анализ асимптотического поведения свободных коагулирующих систем удобно проиллюстрировать на примере α , β -модели (3.21). На рис. 3.1 показано расположение характерных областей в координатах α , β (Пискунов, 1987, 1991). Из-за симметрии $K(g, n)$ достаточно рассмотреть значения $\alpha < \beta$, как это и сделано на рисунке.

Рис. 3.1. Расположение характерных областей для α , β -модели

В области P_2 действует гипотеза самосохранения Фридландера, а в области P_1 , включая границы, формируются сингулярные спектры. При этом внутри P_1 степень сингулярности $\gamma = 1 + \lambda$, а на отрезках $\beta = 0$ и $\lambda = 1$ имеет место неравенство $\gamma < 1 + \lambda$ (Лушников, Пискунов, 19766, 1978). В области P_3 коагуляция сопровождается критическими явлениями, заключающимися в отделении от спектра в некоторый момент anomalно крупных частиц (Лушников, 1978; Домиловский и др., 1978, 1979; Волощук, 1984; Пискунов, 1987) (речь о них пойдет ниже), а в P_4 уравнения коагуляции (3.1), по-видимому, вообще не имеют решения (Домиловский и др., 1979).

3.5. Критические явления в процессе коагуляции

Автомодельный подход к описанию асимптотического поведения коагулирующих систем становится неприемлемым для процессов с быстрорастущими коэффициентами коагуляции, о чем сигнализирует необычное поведение масштаба подобию при $\lambda > 1$:

$$g_a(t) \sim B^{-1}(t) \sim (t_c - t)^{1/(1-\lambda)},$$

вытекающее из разделения переменных (3.45) в уравнении (3.1). Оказывается, что в этом случае процесс коагуляции принимает в некоторый критический момент времени t_c лавинообразный характер, приводящий к отделению от спектра anomalно крупной частицы (или группы частиц), не описываемой уравнением Смолуховского (3.1). Данное явление впервые было предсказано в статье (Лушников, 1978) и обнаружено на уровне численного эксперимента в работах (Домиловский и др., 1978, 1979). Оно получило названия: образование суперчастицы (Лушников, 1978; Домиловский и др., 1978, 1979); gelation (Ziff,

1980; Эрнст, 1988); самоликвидация коагулирующей системы (Волошук, 1984). Нами будет использоваться термин *критические явления*. Наиболее наглядно суть критических явлений можно исследовать аналитически на примере ядра $K_* = 2gn$ с $\lambda = 2$, к чему мы и перейдем.

Выпишем кинетическое уравнение в дискретном варианте (3.3) с $K = K_*$, считая для общности, что массовая концентрация M зависит от времени:

$$\begin{aligned} d_t C_g &= \sum_{n=1}^{g-1} (g-n) n C_{g-n} C_n - 2M(t) g C_g; \\ d_t N &= -M^2(t); \quad N(t) = \sum_{g=1}^{\infty} C_g(t). \end{aligned} \quad (3.52)$$

Если величина M сохраняется, то из второго уравнения (3.52) получим, что $N(t) = N_0 - M^2 t$, т.е. спектр частиц «вымирает» в конечный момент времени: $N(t_1) = 0$ при $t_1 = N_0/M^2$, а далее число частиц становится отрицательным. Постараемся разобраться в этом противоречии более детально. Для простоты возьмем монодисперсные начальные условия $C_g(0) = \delta_{g,1}$, тогда, выделяя временную зависимость концентраций C_g , получаем

$$\begin{aligned} C_g &= U_g t^{g-1} \exp \left[-2g \int_0^t M(s) ds \right]; \\ (g-1) U_g &= \sum_{n=1}^{g-1} (g-n) n U_{g-n} U_n. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Решение уравнений для коэффициентов U_g со стартовым значением $U_1 = 1$ можно получить введением производящей функции. Оно имеет вид

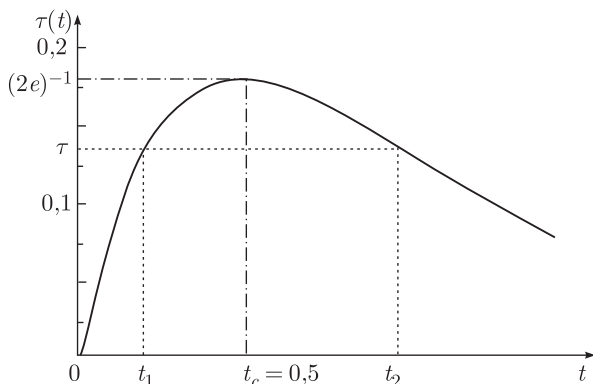
$$U_g = \frac{(2g)^{g-1}}{g!g}; \quad U_g|_{g \gg 1} \approx 2^{g-1} e^g \frac{g^{-5/2}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (3.54)$$

Если зафиксировать значение $M = 1$, то спектр меняется со временем следующим образом:

$$C_g(t) = \frac{U_g \tau^g}{t}; \quad \tau = t e^{-2t}. \quad (3.55)$$

Спектр C_g экспоненциально затухает по g для всех моментов времени, кроме $t = t_c = 0,5$, когда он становится степенным:

$$C_g(t_c)|_{g \gg 1} \approx \frac{g^{-5/2}}{\sqrt{2\pi}},$$

Рис. 3.2. Поведение функции $\tau(t)$

причем особая точка $z_0(t)$ производящей функции $F(z, t)$ приходит в $z_0(t_c) = 1$, а ряд для величины $L_2(t_c)$ расходится. Это весьма важное обстоятельство, поскольку закон сохранения массовой концентрации M , получаемый умножением (3.52) на g и суммированием по g , требует сходимости сумм для $L_2(t)$. Чем же необычно поведение системы при $t \geq t_c$? Попробуем найти массовую концентрацию M при $t \geq t_c$, пользуясь непосредственным суммированием решения (3.55). Для этого обратим внимание на то, что одному и тому же значению τ отвечают два значения t : $t_1 < t_c$ и $t_2 > t_c$ (рис. 3.2). Следовательно, сумма

ряда $\sum_{g=1}^{\infty} g U_g \tau^g = t M(t)$ одна и та же для моментов времени t_1 и t_2 .

Поскольку при $t < t_c$ никаких неприятностей с законом сохранения M происходить не может, то $M(t_1) = 1$, значит, $M(t_2) = t_1/t_2 < 1$. Итак, при $t > t_c$ в системе обнаруживается дефицит массы, несмотря на то, что в самом кинетическом уравнении мы пытались зафиксировать значение $M = 1$.

Содержательная интерпретация этого противоречия заключается в предположении, что при $t > t_c$ в системе появляется аномально крупная частица, не описываемая уравнением Смолуховского, размер которой $G(t)$ сразу уходит на бесконечность, а концентрация бесконечно мала. Однако значение массы этой частицы $\mu(t) = \lim (G C_G) \big|_{G \rightarrow \infty} = 1 - M(t)$ конечно и отлично от нуля.

Уравнение (3.52) и решение (3.55) описывают в такой интерпретации лишь поведение мелкой фракции. Аномальную частицу следует считать активной, поскольку в правой части (3.52) взято $M = 1$, следовательно, она поглощает мелкую фракцию наряду со всеми частицами и влияет на ход коагуляционного процесса. Значение $\mu(t)$ определяется из трансцендентного уравнения (Лушников, 1978; Домилов-

ский и др., 1978, 1979)

$$t = \frac{\ln [1 - \mu(t)]}{2\mu(t)}. \quad (3.56)$$

Убедимся, что аномальная частица именно одна. Для этого сосчитаем сумму ряда

$$\sum_{g=1}^{\infty} U_g \tau^g = t \sum_{g=1}^{\infty} C_g = tN(t).$$

При $t_1 < t_c$ $N(t_1) = 1 - t_1$, следовательно,

$$N(t_2) = (1 - t_1) \frac{t_1}{t_2} = M(t_2) - t_2 M^2(t_2).$$

Дифференцируя по t_2 и используя (3.56), получаем

$$d_t N = M^2(t) - 2M(t) = \mu^2(t) - 1. \quad (3.57)$$

Этот результат противоречит моментным уравнениям (3.2) и второму уравнению в (3.52), поскольку в правой части появился дополнительный член $\mu^2(t)$. Для его интерпретации обратимся к усредненным вероятностным уравнениям (3.13) для ядра K_* , которые просуммируем по g , предполагая, что $\overline{n_k n_m} = \bar{n}_k \bar{n}_m$:

$$d_t N = \chi(t) - 1; \quad \chi(t) \equiv \sum_g \frac{g^2 \bar{n}_g(t)}{V^2} = \frac{L_2(t)}{V}. \quad (3.58)$$

Сравнивая (3.58) с (3.57), видим, что $\chi(t) = \mu^2(t)$. Но это равенство справедливо лишь в том случае, когда аномальная частица одна, поскольку $\chi = \sum_g g^2 \bar{n}_g / V^2 = \left(\sum_g g \bar{n}_g / V \right)^2 = \mu^2$ только при $\bar{n}_g = \delta_{g,G}$.

Приведенная выше интерпретация весьма правдоподобна, но для ее подтверждения требуется дополнительное обоснование, например, на уровне численного эксперимента. С этой целью проводилось численное моделирование марковского процесса, описываемого вероятностными уравнениями (3.9), методом Монте-Карло (Домиловский и др., 1978, 1979). При розыгрыше прослеживалась судьба целого ансамбля конечных коагулирующих систем, развитие которых отличалось последовательностями в датчике случайных чисел, и наблюдалось не только поведение спектра в отдельных системах, но и поведение средних по ансамблю величин. Для ядра K_* во всех отдельных системах при $t > t_c$ возникала частица с массой порядка массы всей системы M , и она была именно одна. Усреднение по ансамблю показало, что имеется сильный рост величины $L_2(t)$ вблизи $t = t_c$, а масса $\mu(t)$, заключенная

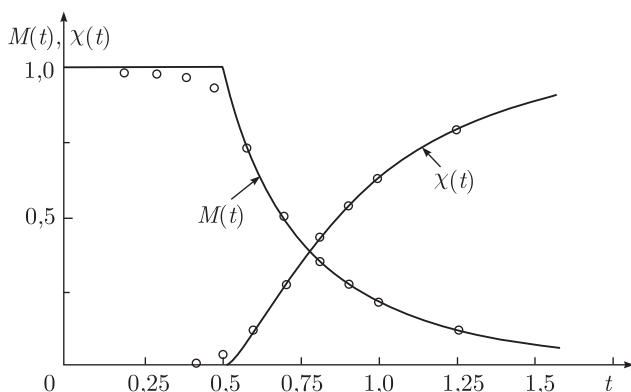


Рис. 3.3. Зависимость массы мелкодисперсной фракции $M(t) = 1 - \mu(t)$ и величины $\chi(t) = L_2(t)/V$ от времени: $\circ$ — $M = 500$; сплошные кривые — $M = \infty$

в частице максимального размера, составляет при $t > t_c$ конечную долю всей массы системы и растет согласно закономерности (3.56). На рис. 3.3 показано усредненное по ансамблю из 226 систем поведение величин $M(t)$ и $\chi(t)$ для монодисперсных начальных условий и значения $M = 500$.

В общем случае при моделировании методом Монте-Карло признаками возникновения критических явлений выбраны (Домиловский и др., 1978, 1979): сильный рост второго момента функции распределения L_2 вблизи некоторого t_c ; стремление при $M \rightarrow \infty$ к постоянному пределу величины $\tau_{1/2}(M)$ — времени достижения максимальной частицей массы $M/2$. Следует отметить, что критические явления обнаружены (Домиловский и др., 1978, 1979) для практически важного ядра гравитационной коагуляции (3.17), что может быть тесно связано с механизмом выпадения осадков из теплых облаков. При этом лавинообразный ход процесса может сглаживаться за счет того, что для крупных капель с радиусом более 200 мкм происходит переход к ядру гравитационной коагуляции (3.18), для которого критические явления не наблюдаются. Отметим также, что в численных расчетах для ядра $K = 2(gn)^3$, расположенного в области P_4 на рис. 3.1, обнаружено стремление $\tau_{1/2}(M) \rightarrow 0$ при $M \rightarrow \infty$. По-видимому, уравнения коагуляции (3.1) для этого ядра вообще не имеют непротиворечивого решения.

Возможен еще один вариант поведения системы после критической точки, который мы проследим (Пискунов, 1987, 1991) на примере ядра K_* . Для этого найдем решение уравнения (3.52) при $t > t_c$, предполагая, что значение $M(t)$ в правой части определяется самосогласованно, путем суммирования получающегося спектра. Физически это отвечает отделению пассивных аномальных частиц, которые после образования

сразу выпадают в осадок и не влияют на поглощение мелкодисперсной фракции. Соответствующее решение (3.52) имеет вид

$$C_g(t) = C_g(t_c) \frac{t_c}{t}; \quad M(t) = \frac{t_c}{t}, \quad t \geq t_c, \quad (3.59)$$

т. е. спектр после t_c все время остается степенным и от него постоянно отделяются аномальные частицы, обеспечивающие отток массы. Динамику такого перехода можно также проследить, исследуя модели коагуляции с резким стоком (Лушников, Пискунов, 1983).

3.6. Коагуляция в присутствии внешних источников частиц

В реальных атмосферных условиях коагуляция зачастую идет на фоне образования частиц дисперсной фазы или их поступления в коагулирующий объем от источников. Источниками могут служить фотохимические реакции, вулканические и промышленные выбросы и т. д. Для стационарных источников кинетика процесса описывается уравнением

$$\partial_t C(g, t) = S(C; g, t) + I(g), \quad (3.60)$$

где $I(g)$ — число частиц массой g , вводимых в единицу времени в единицу объема. В отличие от свободной коагуляции здесь массовая концентрация линейно растет со временем:

$$M(t) = M_0 + Jt; \quad J = \int_0^\infty g I(g) dg. \quad (3.61)$$

Переход к безразмерным переменным несколько отличен от случая свободных систем, поскольку начальный спектр может быть и нулевым. Масштаб g_0 определяется из спектра источника, безразмерное время $K_0 t / V_0$, а единица объема $V_0 \sim (K_0 g_0 / J)^{1/2}$. Решение ряда модельных задач (Лушников, Пискунов, 1976в) показывает, что существуют следующие варианты поведения процесса:

- установление в уширяющемся диапазоне размеров частиц баланса между поступлением частиц от источника и коагуляцией;
- «вымирание» спектра, аналогичное свободной коагуляции.

Для иллюстрации приведем решение (Лушников, Пискунов, 1976в) дискретного варианта уравнения (3.60) с постоянным ядром $K_c = 2$ и с монодисперсным источником $I_g = \delta_{g,1}$. Начальный спектр возьмем нулевым: $C_g(0) = 0$. Уравнение для производящей функции $F(z, t)$ имеет вид

$$\partial_t F = z + F^2 - 2FN; \quad d_t N = 1 - N^2; \quad N(t) = \text{th } t$$

с решением

$$F(z, t) = \text{th } t - \sqrt{1 - z} \text{ th } (t \sqrt{1 - z}).$$

Особенности $F(z, t)$ — простые полюсы $z_k(t) = 1 + [\pi(k - 0,5)/t]^2$. Концентрации $C_g(t)$ можно найти по теореме о вычетах: $C_g(t) = \frac{2}{t} \sum_{k=1}^{\infty} (z_k - 1) z_k^{-g-1}$. Отметим, что $N(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 1$, т. е. с течением времени устанавливается баланс между поступлением частиц от источника и коагуляцией. Чтобы найти стационарные спектры $c^s(g)$ и определить диапазон, в котором они устанавливаются, заметим, что по мере возрастания t полюсы z_k сближаются и сумму по k можно заменить интегралом

$$C_g(t) \approx \frac{2}{\pi} \int_{\pi/2t}^{\infty} u^2 (1+u^2)^{-g-1} du \xrightarrow{t \rightarrow \infty} c^s(g) = \frac{(2g-3)!!}{2^g g!} \approx \frac{g^{-3/2}}{2\sqrt{\pi}}. \quad (3.62)$$

Нижний предел в (3.62) можно заменить нулем, если точка передела подынтегрального выражения $u_m = 1/\sqrt{g}$ много больше, чем само значение нижнего предела $\pi/2t$. Отсюда легко получить, что стационарные спектры $c^s(g)$ имеют степенной вид и реализуются в уширяющемся со временем диапазоне размеров $g \ll 4t^2/\pi^2$. При $g \geq 4t^2/\pi^2$ спектр, определяемый (3.62), существенно нестационарен и экспоненциально убывает по g .

Наиболее полные сведения о поведении спектров в асимптотическом режиме для систем с источником можно получить, используя автомодельный подход (Лушников, Пискунов, 1977; Пискунов, 1986а). Соображения подобия и закон роста (3.61) величины $M(t)$ приводят к следующему виду асимптотических спектров и масштаба подобия:

$$\begin{aligned} C(g, t) &= JtB^2(t)\Psi(x); \quad x = gB(t); \\ g_a(t) &\sim B^{-1}(t) \sim t^{2/(1-\lambda)}; \quad \lambda < 1. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Автомодельные распределения $\Psi(x)$ в системах с источником обычно сингулярны, причем смысл параметра a очень нагляден — это характерный размер частиц, поступающих от источника. Уравнение для автомодельной функции выводится аналогично (3.46) и имеет вид (Лушников, Пискунов, 1977; Пискунов, 1986а)

$$\begin{aligned} \frac{2x\Phi_0(x)}{1-\lambda} &= \frac{J}{2} \int_0^x \Omega(x-y, y) dy - \int_x^{\infty} \Phi_0(y) dy; \\ \int_0^{\infty} y\Psi(y) dy &= \int_0^{\infty} \Phi_0(y) dy = 1, \quad \lambda < 1, \end{aligned} \quad (3.64)$$

где Ω определено в (3.46), $\Phi_0(x) = \int_x^{\infty} \Psi(y) dy$.

Решение уравнения (3.64) для постоянного ядра $K_c = 2$ и $J = 1$ находится с помощью преобразования Лапласа $\tilde{\Phi}_0(p) = \int_0^\infty e^{-px} \Phi_0(x) dx$ (Лушников, Пискунов, 1977; Пискунов, 1986а):

$$2d_p \tilde{\Phi}_0 + \frac{\tilde{\Phi}_0}{p} + \tilde{\Phi}_0^2 = \frac{1}{p}; \quad \tilde{\Phi}_0(0) = 1; \quad \tilde{\Phi}_0(p) = \frac{\text{th} \sqrt{p}}{\sqrt{p}}. \quad (3.65)$$

Обращение преобразования Лапласа дает $\Phi_0(x) = \theta_2(0|i\pi x)$, где θ_2 — тэта-функция. Асимптотика $\Psi(x) = -d_x \Phi_0(x)$ при $x \ll 1$ и при $x \gg 1$ следующая:

$$\begin{aligned} \Psi(x)|_{x \ll 1} &\approx \frac{1}{2\sqrt{\pi} x^{3/2}} \left[1 + \frac{4 \exp(-1/x)}{x} \right]; \\ \Psi(x)|_{x \gg 1} &\approx \frac{\pi^2}{2} \exp\left(-\frac{\pi^2 x}{4}\right). \end{aligned} \quad (3.66)$$

Поведение $\Psi(x)$ при $x \ll 1$ ($g \ll g_a(t) \approx t^2$) определяет полученные ранее стационарные спектры $c^s(g)$ из (3.62), поскольку временные множители при подстановке (3.66) в (3.63) сокращаются.

Легко проверить, что для произвольного ядра общее решение автомодельного уравнения (3.64) при $x \ll J^{1/(1-\lambda)}$ следующее:

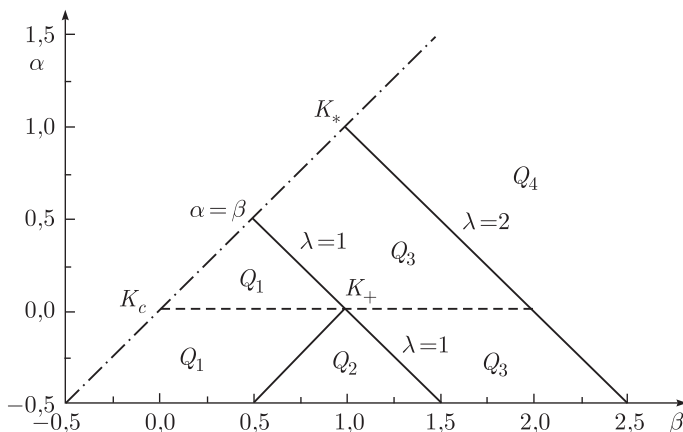
$$\begin{aligned} \Psi(x) &\approx A J^{-1/2} x^{-(3+\lambda)/2}; \\ A^{-2} &= \frac{1}{2} \int_0^1 dv \int_v^\infty ds \int_{1-v}^\infty du K(s, u) (su)^{-(3+\lambda)/2}. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Этот результат позволяет сразу же установить, что в диапазоне $a \ll g \ll g_{\max}(t)$, где $g_{\max}(t) = (t\sqrt{J})^{2/(1-\lambda)}$, формируются стационарные степенные спектры

$$C(g, t) \approx \sqrt{J} t g_a^{-2}(t) A \left[\frac{g}{g_a(t)} \right]^{-(3+\lambda)/2} = A \sqrt{J} g^{-(3+\lambda)/2} = c^s(g), \quad \lambda < 1. \quad (3.68)$$

При этом требуется сходимость интеграла для A в формуле (3.67). Для $x \ll J^{1/(1-\lambda)}$ функция $\Psi(x)$ экспоненциально убывает, что приводит к сильному падению спектров $C(g, t)$ при $g \gg g_{\max}(t)$.

Автомодельный подход дает ключ к общему анализу асимптотического поведения систем со стационарным источником (Пискунов, 1987, 1991). На рис. 3.4, аналогичном рис. 3.1 для свободных систем, показано расположение характерных областей на α, β -плоскости. В области

Рис. 3.4. α , β -диаграмма для систем с источником

Q_1 формируются стационарные режимы, а в области Q_2 коагуляция идет настолько быстро, что стационарный режим не наступает (Лушников и др., 1981). Критерием этого служит расходимость интеграла в формуле (3.67) для A . В Q_3 должны начаться критические явления, а в Q_4 решений уравнения (3.60), по-видимому, вообще не существует. С практической точки зрения наиболее важно формирование в области Q_1 сильно полидисперсных стационарных спектров, которые имеют степенной вид (3.68). Как показано на рис. 1.1, такое же поведение характерно для спектров Юнге атмосферных аэрозольных частиц.

Описанная выше картина мало меняется для источников с монотонной зависимостью интенсивности от времени (Пискунов, 1986б): $J(t) = J_0 t^{p-1}$, $p > 0$. Вместо стационарных распределений (3.68) формируются квазистационарные спектры, следящие за текущей интенсивностью источника в уширяющемся со временем диапазоне размеров $a \ll g \ll g_{\max}(t)$:

$$C(g, t) \approx A \sqrt{J(t)} g^{-(3+\lambda)/2}; \quad g_{\max}(t) = \left(\frac{t \sqrt{J(t)}}{p} \right)^{2/(1-\lambda)}. \quad (3.69)$$

Условия реализации стационарных и квазистационарных режимов совпадают.

В реальных атмосферных процессах объемные источники могут испытывать колебания интенсивности с периодами τ от суток до года, например, фотохимические реакции в атмосфере, выветривание пород. Характерной особенностью поведения спектров в этом случае является (Пискунов, 1986б; Лушников и др., 1986) установление периодических режимов при $t \gg \tau$, причем в начальной области размеров $g \ll g_p(\tau) \sim \tau^{2/(1-\lambda)}$ спектры отслеживают колебания источника $J(t) = J(t + \tau)$, а в средней части $g_p(\tau) \leq g \ll g_{\max}(t)$ колебания

сглажены и фактически спектр имеет степенной вид (3.68), определяемый усредненным по времени значением интенсивности $\overline{J(t)}$. Данный результат позволяет объяснить сезонные колебания концентрации атмосферных аэрозолей в области малых размеров и устойчивость степенных спектров в среднем диапазоне размеров частиц.

3.7. Совместное действие процессов коагуляции и дробления

Наиболее важным конкурирующим с коагуляцией процессом является дробление частиц при их движении в среде-носителе. Как уже обсуждалось, этот процесс должен постоянно подпитываться энергией среды-носителя, поскольку он приводит к увеличению суммарной поверхности частиц дисперсной фазы. В пространственно одномерной системе кинетическое уравнение с учетом дробления имеет вид

$$\partial_t C = S(C; g, t) + R(C; g, t), \quad (3.70)$$

где R — символическая запись оператора дробления. При этом значение массовой концентрации M по-прежнему сохраняется. В реальных случаях причиной дробления крупных частиц могут служить турбулентные пульсации или скоростной напор в среде-носителе (самопроизвольное дробление), либо сам процесс соударения, когда сталкивающиеся частицы не сливаются, а дробятся с образованием мелких капель-сателлитов (вынужденное дробление). В первом случае оператор R линеен по концентрациям, во втором — квадратичен. Наибольший интерес представляют стационарные режимы, когда с течением времени коагуляция и дробление начинают компенсировать друг друга. Стационарные спектры $c^s(g)$ находятся из уравнения

$$S(c^s; g) + R(c^s; g) = 0; \quad \int_0^\infty g c^s(g) dg = M. \quad (3.71)$$

Обратимся к конкретному виду оператора R для процессов самопроизвольного и вынужденного дробления. Прежде всего, введем две величины: вероятность дробления в единицу времени $P(g)$ и спектр осколков $\theta(g, n)$, на которые распадается частица g . Функция $\theta(g, n)$ нормирована так, чтобы масса в процессе распада сохранялась: $\int_0^g \theta(g, n) n dn = g$. Для самопроизвольного дробления оператор R имеет вид (Melzac, 1957)

$$R(C; g, t) = \int_g^\infty \theta(n, g) P(n) C(n) dn - C(g) P(g); \quad \int_0^\infty R(C; g, t) g dg = 0. \quad (3.72)$$

Второе равенство в (3.72) свидетельствует о том, что материальный баланс в процессе дробления соблюдается. В работах (Пискунов, 1985а, 1985б) приведено решение стационарного уравнения (3.71) для ряда модельных зависимостей $K(g, n)$, $\theta(g, n)$ и $P(g) = bg^\beta$. Общий итог аналитических результатов следующий: стационарные спектры имеют вид гамма-распределений $c^s(g) \approx Ag^\gamma e^{-\alpha g}$, что справедливо для наблюдаемых спектров атмосферных аэрозолей в области больших размеров частиц. Параметры A , γ , α зависят от степени однородности ядра λ и величин b , β . Стационарные режимы реализуются не всегда, иногда необходимо выполнение условия $b > aM$, где a — константа порядка единицы. Следовательно, увеличением массовой концентрации в ряде случаев можно добиться нарушения равновесия между коагуляцией и дроблением в системе и обеспечить необратимый рост характерных размеров частиц. Этот вывод важен для практических задач по очистке несущей среды от дисперсной фазы.

Процессы коагуляции и самопроизвольного дробления частиц в вероятностной постановке задачи исследованы в работе (Домиловский и др., 1980), где аналитически найдены стационарные вероятности $W_s(Q)$ при выполнении принципа детального равновесия:

$$W_s(Q) = \frac{M!W_1(M)}{V^M} \prod_{g=1}^M \frac{V^{n_g}}{n_g!(\Phi_g)^{n_g}}; \quad n_g = n_g(Q); \quad \sum_{g=1}^M gn_g = M. \quad (3.73)$$

Здесь $W_1(M)$ — множитель, определяемый условием нормировки $\sum_Q W_s(Q) = 1$, а Φ_g — произвольная функция, связывающая коэффициенты коагуляции и вероятности дробления. Остальные обозначения совпадают с разд. 3.1.

Обратимся теперь к процессу вынужденного дробления. Для этого введем дополнительную величину $w(g, n)$ — вероятность объединения частиц g и n при столкновении (соответственно $r(g, n) = 1 - w(g, n)$ означает вероятность дробления). Тогда оператор S имеет прежний вид (1.1) с заменой $K(g, n) \rightarrow w(g, n)K(g, n)$, а оператор R записывается в форме (Сафронов, 1969)

$$R(C; g, t) = -C(g) \int_0^\infty r(g, n) K(g, n) C(n) dn + \frac{1}{2} \int_g^\infty \theta(n, g) \int_0^n \times \\ \times r(n - m, m) K(n - m, m) C(n - m) C(m) dm dn. \quad (3.74)$$

Для механики аэрозолей одним из реалистичных является предположение, что существует некоторый критический размер G (не путать

с критическим размером частиц в пересыщенном паре), ниже которого дробление невозможно, а выше обязательно происходит, т. е.

$$w(n, g - n) = 1, \quad g \leq G; \quad w(n, g - n) = 0, \quad g > G. \quad (3.75)$$

В этом случае весь спектр сосредоточен на отрезке $0 \leq g \leq G$, а виртуально возникающие частицы с массами $G < g \leq 2G$ сразу же дробятся на осколки $n \leq G$. Второй член в выражении (1.1) для оператора S интегрируется теперь до предела G , а оператор R имеет вид (Лушников, Пискунов, 1984; Пискунов, 1985а)

$$R(C; g, t) = \frac{1}{2} \int_0^G \int_{G-m}^G \theta(m+n, g) K(m, n) C(m) C(n) dm dn \equiv I(C; g, t), \quad (3.76)$$

отвечающий действию некоторого самосогласованного источника частиц I . Сравнительно просто получить аналитические результаты для дискретного варианта кинетического уравнения дробления частиц на мономеры: $\theta(g, n) = g\delta_{n,1}$. Тогда оператор $I \equiv R$ в (3.76) имеет вид

$$I(C; g, t) = J(G)\delta_{g,1};$$

$$J(G) = \sum_{n=1}^G \sum_{m=G+1-n}^G (m+n) K(m, n) C_m C_n. \quad (3.77)$$

Для ядра $K_c = 2$ уравнение

$$\sum_{n=1}^{g-1} c_{g-n}^s c_n^s - 2c_g^s \sum_{n=1}^G c_n^s + \delta_{g,1} J(G) = 0, \quad (3.78)$$

определяющее стационарные спектры c_g^s , удобно решать с помощью производящей функции $F_s(z) = \sum_{g=1}^{\infty} z^g c_g^s$. Поскольку спектр частиц

в данной постановке задачи заключен в интервале $1 \leq g \leq G$, то $F_s(z)$ определяет как реальные концентрации, так и фиктивные c_g^s при $g > G$, на поведение которых можно не обращать внимание. Ясно также, что $N_s = \sum_{g=1}^G c_g^s \neq F_s(1)$. Решение уравнения (3.78) следующее (Лушников, Пискунов, 1984; Пискунов, 1985а):

$$F_s(z) = N_s \left(1 - \sqrt{1 - \frac{zJ}{N_s^2}} \right);$$

$$c_g^s|_{g \gg 1} \approx \frac{N_s \exp(\alpha g)}{2\sqrt{\pi} g^{3/2}}; \quad \alpha(G) = \ln \left[\frac{J(G)}{N_s^2(G)} \right]. \quad (3.79)$$

Из физических соображений ясно, что при увеличении G величина $\alpha(G)$ должна убывать по крайней мере $\sim G^{-1}$, иначе стационарные концентрации c_g^s в (3.79) будут экспоненциально расти при $g \sim G \rightarrow \infty$, что противоречит конечности сохраняющейся массовой концентрации M , задаваемой начальными условиями. Следовательно, стационарный режим формируется таким образом, чтобы обеспечивалось равенство

$$\frac{J(G)}{N_s^2(G)} \approx 1 + \frac{\xi_0}{G}; \quad \alpha(G) \approx \frac{\xi_0}{G}.$$

Подстановка спектров c_g^s из (3.79) в (3.77) и замена суммирования интегрированием дает уравнение для определения константы ξ_0 , которое решалось численно и привело к значению $\xi_0 = 0,854033$. Кроме того, в работах (Лушников, Пискунов, 1984; Пискунов, 1985а) определена связь между величинами $N_s(G)$, $J(G)$ и M , которая приводит к следующему окончательному ответу:

$$c^s(g) = \frac{M}{G^2} \Psi(x); \quad x = \frac{g}{G}; \quad \Psi(x) = \xi_0 \frac{\exp[\xi_0 x]}{x^{3/2}}. \quad (3.80)$$

Другие аналитические решения стационарного уравнения (3.71) с оператором R из (3.76) получены (Лушников, Пискунов, 1984; Пискунов, 1985а) для модельных ядер $K_\beta(g, n) = 2(gn)^\beta$. Оказывается, что при $\beta < 1/2$ стационарные спектры имеют универсальный вид, подобный автомодельным зависимостям:

$$c^s(g) = \frac{M}{G^2} \Psi(x); \quad x = \frac{g}{G}; \quad \int_0^1 x \Psi(x) dx = 1. \quad (3.81)$$

Однако при $\beta \geq 1/2$ универсальная форма спектров (3.81) теряется, причем стационарные спектры не исчезают в асимптотическом пределе $G \rightarrow \infty$, хотя по физическому смыслу условие $G = \infty$ должно отключать процессы дробления и стационарный спектр обязан быть нулевым, аналогично свободной коагуляции. Точно так же не удалось прийти к однозначным результатам для ядра K_+ и дробления на мономеры. Для производящей функции $F_s(z)$ получено дифференциальное уравнение первого порядка, но найти окончательный ответ не удастся. Анализ поведения $F_s(z)$ показывает, что в особой точке возникает сложный характер ветвления. Данные задачи ждут своего решения.

Несмотря на эти проблемы, можно высказать гипотезу, что стационарные режимы в процессе коагуляции с вынужденным дроблением формируются, по-видимому, практически всегда, поскольку увеличение скорости коагуляции $K(g, n)$ одновременно приводит и к увеличению скорости дробления частиц в закритической области.

3.8. Модели коагуляции с выпадением частиц в осадок

В моделях коагуляции с плавным стоком (Лушников и др., 1984; Пискунов, 1986в) предполагается, что в системе присутствуют две фракции частиц: активная (коагулирующая) и пассивная (осадок). Кроме того, существует необратимый переход из активной фракции в пассивную, определяемый скоростью $B(g)$, зависящей от размеров частиц. Кинетическое уравнение для коагуляции со стоком имеет вид

$$\begin{aligned}\partial_t C^-(g, t) &= S(C^-; g, t) - B(g) C^-(g, t); \\ \partial_t C^+(g, t) &= B(g) C^-(g, t),\end{aligned}\tag{3.82}$$

где выделены концентрации активных частиц $C^-(g, t)$ и частиц в осадке $C^+(g, t)$. Например, если частицы подвержены физико-химическим процессам, приводящим к потере их способности к коагуляции (покрытие поверхности частиц внешними стабилизирующими оболочками), то для описания динамики изменения спектров необходимо пользоваться уравнениями (3.82). Можно представить себе и обратный случай, когда частицы переходят из пассивной фракции в активную, например, полимеризация молекул в растворе (Leyvraz and Tschudi, 1980) или процесс разрушения защитных оболочек эритроцитов (коагуляция крови). Тогда кинетическое уравнение имеет вид

$$\begin{aligned}\partial_t C^-(g, t) &= S(C^-; g, t) + B(g) C^+(g, t); \\ \partial_t C^+(g, t) &= -B(g) C^+(g, t).\end{aligned}\tag{3.83}$$

Решение (3.83) более тривиально, поскольку из второго уравнения сразу находится закон изменения спектра пассивной фракции $C^+(g, t) = C^+(g, 0) \exp[-B(g)t]$ и этот спектр служит «гаснущим» источником для частиц активной фракции. В результате формирование концентраций $C^-(g, t)$ подобно свободной коагуляции с результирующей массовой концентрацией, полученной из пассивной фракции, поскольку $d_t M^- = -d_t M^+$.

Уравнения (3.82) служат наиболее простой моделью выпадения частиц из ограниченного коагулирующего объема, когда процесс выпадения происходит без нарушения пространственной однородности. Если обозначить за $\tau(g)$ время жизни частицы g в объеме, то скорость выведения частиц из системы $B(g) = 1/\tau(g)$. Например, для гравитационного выпадения частиц из облака $B(g) \sim u(g)/H$, где $u(g)$ — скорость седиментации, H — характерные вертикальные размеры облака. Наиболее наглядно применение уравнений (3.82) в задачах переноса аэрозольных атмосферных загрязнений, когда коагулирующие частицы находятся в подоблачном слое и происходит вымывание загрязнений осадками (Simons, 1981). Решения кинетических уравнений (3.82)

получены в работах (Simons, 1981; Пискунов, 1986в) для модельных коэффициентов коагуляции (3.22) и стока, не зависящего от размеров частиц: $B(g) = \mu = \text{const}$. В последней работе проанализированы закономерности «вымирания» спектров частиц в активной фракции и получены результирующие спектры осадка. Интересно, что для достаточно интенсивного стока с $\mu > L_2^-(0)$ критические явления при коагуляции с ядром K_* исчезают.

Другой моделью выпадения частиц в осадок является коагуляция с резким стоком (Лушников, Пискунов, 1982, 1983), в которой вводится некоторый критический размер G и считается, что частицы с массой $g > G$ теряют способность к коагуляции. При этом фактически используется следующая грубая аппроксимация скорости удаления частиц: $B(g) = 0$ при $g < G$; $B(g) = \infty$ при $g > G$. На практике значение G можно определить, сравнивая времена выпадения частиц из облака $\tau(g)$ с характерными временами коагуляции частиц массой g . В этой модели частицы активной фракции сосредоточены в интервале масс $0 \leq g \leq G$, их концентрация $C^-(g, t)$ с течением времени убывает, а частицы с массами $G \leq g \leq 2G$ собираются в осадок. Уравнения для изменения спектров можно получить из (3.1), полагая формально $K(g, n) = 0$ при $g, n > G$:

$$\begin{aligned} \partial_t C^-(g, t) = & \frac{1}{2} \int_0^g K(g-s, s) C^-(g-s, t) C^-(s, t) ds - \\ & - C^-(g, t) \int_0^G K(g, s) C^-(s, t) ds; \end{aligned} \quad (3.84)$$

$$\partial_t C^+(g, t) = \frac{1}{2} \int_{g-G}^G K(g-s, s) C^-(g-s, t) C^-(s, t) ds. \quad (3.85)$$

Уравнение (3.84) для спектра активной фракции должно решаться отдельно, а поведение спектра осадка получается затем интегрированием (3.85). К сожалению, из-за интегрирования в конечных пределах применение преобразования Лапласа к решению (3.84) приводит к громоздким выкладкам, по той же причине нецелесообразно использовать аппарат производящих функций для решения дискретного аналога (3.84). В этом случае наиболее пригоден так называемый $V - \tau$ -метод (Lushnikov, 1973), в котором вводится новая независимая переменная τ и безразмерные концентрации $V(g, \tau)$:

$$\tau = \int_0^t C_1(s) ds; \quad V_1(\tau) = 1; \quad V_g(\tau) = \frac{C_g(\tau)}{C_1(\tau)}. \quad (3.86)$$

В работах (Лушников, Пискунов, 1982, 1983) для модельных ядер (3.22) с помощью $V - \tau$ -метода проанализированы закономерности перехода спектров из активной фракции в пассивную и получены результирующие спектры осадка. Например, для ядра $K_c = 2$ и монодисперсных начальных условий получено следующее решение:

$$C_g^-(\tau) = \tau^{g-1} \exp[-2I(\tau)];$$

$$C_g^+(\tau) = (2G+1-g) \int_0^\tau \eta^{g-2} \exp[-2I(\eta)] d\eta; \quad I(\tau) \equiv \int_0^\tau \frac{(1-\eta^G)}{(1-\eta)} d\eta. \quad (3.87)$$

При $\tau < 1$ спектр активной фракции еще не чувствует границы G и определяется формулой (3.24), а масса осадка мала, как τ^G . Выпадение частиц в осадок происходит вблизи точки $\tau = 1$, что отвечает времени $t \sim G$. Окончательный спектр осадка имеет вид

$$C_g^+(\infty) = \frac{R(u)}{G^2}; \quad u = \frac{(g-G)}{G};$$

$$R(u) = (1-u) \int_{-\infty}^{\infty} \exp[(1+u)s - 2Q(s) - 2C] ds; \quad Q(s) = \int_0^s \frac{e^\eta - 1}{\eta} d\eta, \quad (3.88)$$

где C — постоянная Эйлера. В модели K_+ выпадение частиц в осадок происходит вблизи точки $\tau = 0,5$, что отвечает времени $t \sim \ln G$. Окончательный спектр осадка имеет аналогичный (3.88) вид со следующей функцией $R(u)$:

$$R(u) = \frac{\exp[\xi_0(1+u)](1-u)}{\pi\sqrt{u}(1+u)^2}; \quad \xi_0 = 0,854033. \quad (3.89)$$

В модели K_* интенсивное выпадение в осадок начинается в момент времени $t \approx t_c = 0,5$, а поведение активной фракции спектра при $t > t_c$ аналогично (3.59), т.е. отвечает отделению пассивной аномальной частицы. Окончательный спектр осадка полностью совпадает с (3.89).

Дальнейшим обобщением моделей выпадения осадков в коагулирующих системах и приближением к реальным процессам формирования спектров частиц в атмосфере является дополнительное введение источников в кинетические уравнения (3.82), (3.84). Добавление постоянно действующих источников кардинально меняет ситуацию, поскольку в активной части спектра возможно установление стационарных режимов, играющих важную роль для объяснения реальных спектров атмосферных аэрозолей (Сергеев, 1977; Смирнов, Сергеев, 1980; Волощук, 1983, 1984). Разнообразные аналитические решения для модельных ядер (3.22) получены для этого случая в работах (Лушников и др.,

1984; Пискунов, 1986б, 1986в). В асимптотической стадии процесса для систем с источником и стоком в активной части спектра устанавливаются стационарные режимы, а спектр осадка линейно растет со временем. По сравнению с полученными ранее степенными спектрами (3.68) в системах с плавным стоком наблюдается сильное (экспоненциальное) падение концентраций в области крупных размеров частиц, что характерно для так называемых гигантских частиц в спектрах атмосферных аэрозолей (см. рис. 1.1). В системах с резким стоком степенные спектры (3.68) приобретают универсальную поправку, зависящую от отношения g/G . Для броуновской коагуляции с ядром (3.15) и различных типов стоков численно найдены универсальные зависимости для стационарных спектров (Пискунов, 1986в, 1987), которые могут быть проверены, например, на экспериментах в аэрозольной камере с фотохимическим источником частиц.

Коагуляция может играть важную роль не только в самом аэрозольном облаке, которое обычно хорошо перемешивается за счет восходящих течений и турбулентности, но и в подоблачном слое, когда крупные капли выпали из облака и движутся затем под действием силы тяжести. Деформация спектра происходит за счет столкновения капель, движущихся с различными скоростями седиментации $u(g)$ (коагуляция осадков). Если пренебречь испарением и дроблением капель, то в стационарном режиме изменение спектров капель по координате z описывается уравнением (3.6), в котором роль концентраций играют потоки $j(g, z) = u(g) C(g, z)$ (координата z отсчитывается от нижней кромки облака). При движении капель в стоковом режиме модифицированные коэффициенты гравитационной коагуляции $\tilde{K}$ в уравнении (3.6) имеют вид

$$\tilde{K}(g, n) = 2(gn)^{-2/3} (g^{1/3} + n^{1/3})^2 |g^{2/3} - n^{2/3}|; \quad \lambda = 0. \quad (3.90)$$

Поскольку условия (3.43) не выполняются, то для этого однородного ядра при любых начальных условиях (кроме монодисперсных) формируется обычный (несингулярный) автомодельный режим (3.38), (3.41). На больших расстояниях z от основания облака величины $j(g, z)$ ведут себя подобным образом: $j(g, z) \approx z^{-2} \Psi(g/z)$. Универсальная функция Ψ численно найдена в работе (Лушников, Пискунов, 1976а), где также проверен выход решений на автомодельный режим. Соображения подобия позволяют сделать вывод (Пискунов, 1987), что при вымывании загрязняющих веществ в подоблачном слое осадками средняя концентрация примесей $\bar{q}$ в осадках убывает с ростом их интенсивности:

$$\bar{q} \sim J^{-1/3}, \quad \text{где} \quad J = \int_0^\infty g j(g, 0) dg = \text{const}.$$

В заключение приведем формулировку кинетического уравнения коагуляции с учетом конденсации, движения частиц, их дробления,

а также наличия источников и стоков. Для этого в правую часть (3.4), (3.5) добавим вклады, описываемые оператором R и функциями источника $I(g, t)$ и стока $B(g)C(g, t)$:

$$\begin{aligned} \partial_t C(g, \mathbf{x}, t) + \partial_g [v_g C(g, t)] + \operatorname{div} [\mathbf{u} C(g, \mathbf{x}, t)] = \\ = S(C; g, \mathbf{x}, t) + R(C; g, t) + I(g, t) - B(g) C(g, t). \end{aligned} \quad (3.91)$$

Явный вид входящих в (3.91) слагаемых и разнообразные варианты поведения спектров частиц обсуждались нами выше. В ряде случаев возможно установление стационарных режимов, в которых коагуляция и поступление частиц от источника уравниваются дроблением и стоками частиц. Решение уравнения (3.91) и его стационарного аналога, по-видимому, можно осуществить только численными методами.

3.9. Коагуляция частиц в разреженной среде

Во многих задачах астрофизики и физики верхних слоев атмосферы Земли приходится иметь дело с астрозольными облаками, на эволюцию которых существенное влияние оказывают процессы упругих и неупругих столкновений частиц между собой. Сами по себе астрозоли являются довольно своеобразным объектом, поскольку «газ» частиц обладает одновременно как свойствами газодинамической среды, имеющей в равновесном случае некоторое поле температур и скоростей направленного движения, так и свойствами многокомпонентной дисперсной фазы, состав которой меняется за счет упругих столкновений и коагуляции. Полное описание процессов упругих и неупругих столкновений достигается лишь при введении полной функции распределения частиц по размерам и скоростям $C(g, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t)$, определяющей число частиц, состоящих из g мономеров, в единице объема в точке $\mathbf{x}$ в момент времени t , имеющих хаотическую скорость $\mathbf{v}$.

Будем считать, что частота упругих столкновений гораздо больше, чем неупругих, следовательно, распределение частиц по $\mathbf{v}$ является максвелловским с некоторой температурой $T(\mathbf{x}, t)$:

$$C(g, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t) = C(g, \mathbf{x}, t) \left(\frac{g\omega}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{g\omega v^2}{2kT} \right), \quad (3.92)$$

где ω — масса мономера. Кроме того, обозначим через $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ скорость направленного движения частиц, которую будем считать одинаковой для всех частиц, аналогично движению смеси газов. Согласно (3.5) эволюция спектра определяется уравнением $\partial_t C + \operatorname{div} (\mathbf{u} C) = S(C)$. В задачах с газодинамическим движением облака астрозолей более удобно оперировать безразмерными удельными концентрациями $W = \omega C / M$ (M — массовая концентрация частиц), изменение которых

подчиняется уравнению

$$D_t W \equiv \partial_t W + \mathbf{u} \nabla W = MS(W)/\omega, \quad (3.93)$$

где D_t означает субстанциональную производную. Конкретный вид ядра K в операторе S определяется механизмом столкновений частиц. В данном случае это броуновская коагуляция в свободномолекулярном режиме с ядром (3.16), умноженным на вероятность слияния частиц при соударениях α . Доля неупругих столкновений α должна быть много меньше единицы, чтобы успевало устанавливаться максвелловское распределение (3.92). При решении (3.93) удобно использовать лагранжевы переменные, в которых частная производная по времени эквивалентна субстанциональной. Для одномерных движений в качестве лагранжевой координаты обычно используется массовая координата m , отсчитываемая от свободной границы. Концентрации $W(g, m, t)$ подчиняются более простому, чем (3.93), уравнению (3.1) с ядром K , зависящим от m и t (Анисимов, Пискунов, 1990):

$$K(g, n, m, t) = \frac{\alpha}{\omega V(m, t)} \left[\frac{6kr_0 T(m, t)}{\rho_p} \right]^{1/2} (g^{-1} + n^{-1})^{1/2} (g^{1/3} + n^{1/3})^2, \quad (3.94)$$

где $V = M^{-1}$ — удельный объем.

Процесс коагуляции влияет на динамику изменения внутренней энергии в каждой лагранжевой точке, поскольку избыток энергии при неупругих столкновениях превращается в тепло и, в конечном счете, отводится из системы, например, за счет излучения. Тем самым уравнения движения «газа» частиц должны учитывать отток энергии из системы, обусловленный коагуляцией. Как показано в работе (Анисимов, Пискунов, 1990), это приводит к следующему уравнению баланса:

$$3\partial_t \ln T + 2\partial_t \ln V = \partial_t \ln N, \quad (3.95)$$

где N — удельная счетная концентрация частиц, изменение которой определяется кинетикой процесса коагуляции. Учитывая, что давление $p = NkT/V$, получаем следующие уравнения движения для «газа» частиц:

$$\partial_t V = \partial_m u; \quad \partial_t u = -\partial_m p; \quad 3\partial_t \ln p + 5\partial_t \ln V = 4\partial_t \ln N. \quad (3.96)$$

Кинетическое уравнение коагуляции удобно решать для безразмерного времени τ :

$$\tau(m, t) = b \int_0^t ds \left[\frac{N(m, s)}{N(m, 0)} \right]^{1/6} \left[\frac{V(m, 0)}{V(m, s)} \right]^{4/3}, \quad (3.97)$$

$$b = \frac{\alpha}{\omega V(m, 0)} \left[\frac{6kr_0 T(m, 0)}{\rho_p} \right]^{1/2},$$

поскольку оно принимает универсальный для всех m, t вид

$$\begin{aligned} \partial_t W(g, t) = \frac{1}{2} \int_0^g K_b(g-s, s) W(g-s, t) W(s, t) ds - \\ - W(g, t) \int_0^\infty K_b(g, s) W(s, t) ds \quad (3.98) \end{aligned}$$

с безразмерным ядром K_b , определяемым по формуле (3.16), и условием нормировки $\int_0^\infty gW(g) dg = 1$. Значение N находится интегрированием решения $W(g)$ по g . Таким образом, полная система уравнений, определяющих движение в одномерном разлетающемся облаке астрозолей и изменение в нем спектра частиц, сформулирована. Отметим, что для одинаковых по объему облака начальных спектров уравнение (3.98) достаточно решить один раз, используя затем результаты для перехода к произвольным m и t по (3.97) и для решения уравнений движения (3.96) с соответствующими начальными условиями.

В работе (Лушников, Токарь, 1978) сформулированная выше задача решена для пространственно однородного покоящегося облака астрозолей. Основной интерес в этом случае представляет динамика охлаждения облака и эволюция спектров частиц со временем. Прежде всего отметим, что для покоящегося «газа» частиц $3d_t \ln T = d_t \ln N$, следовательно, $(T/T_0) = (N/N_0)^{1/3}$ и переменная τ в (3.97) имеет следующий простой вид:

$$\tau(t) = \frac{M\alpha}{\omega} \left[\frac{6kr_0}{\rho_p} \right]^{1/2} \int_0^t T^{1/2}(s) ds; \quad d_t \tau \sim T^{1/2}(\tau). \quad (3.99)$$

Асимптотическое поведение решений кинетического уравнения (3.98) для броуновской коагуляции в свободномолекулярном режиме хорошо известно (Lai et al., 1972) и описывается несингулярными автомодельными распределениями (3.38), (3.41), причем для ядра (3.16) $N(\tau) \sim \tau^{-1/(1-\lambda)} \sim \tau^{-6/5}$, следовательно, $T \sim \tau^{-2/5}$. Тогда из второго соотношения в (3.99) получим, что $\tau \sim t^{5/6}$, т.е. $N(t) \sim t^{-1}$, $T \sim t^{-1/3}$. Тем самым темп остывания облака за счет потерь энергии на неупругие столкновения и дальнейшее высвечивание, а также закон изменения числа частиц в облаке найдены.

Спектр частиц в асимптотической стадии описывается выражением (3.41), где универсальная функция $f(x)$ рассчитана в работе (Lai et al., 1972).

Переходя к динамическим задачам разлета облака (Анисимов, Пискунов, 1990), отметим одно важное обстоятельство, вытекающее

из (3.97), (3.98): если в процессе разлета удельный объем увеличивается при больших t быстрее, чем $t^{3/4}$, то интеграл в (3.97) заведомо сходится, следовательно, моменту времени $t = \infty$ отвечает конечное значение переменной $\tau = \tau_{\text{as}}$. Таким образом, уравнение (3.98) должно рассматриваться на конечном промежутке $0 \leq \tau \leq \tau_{\text{as}}$, т. е. из-за быстрого разлета спектр частиц стабилизируется (происходит «закалка» спектра). Температурная часть спектра (3.92) продолжает изменяться из-за охлаждения облака, однако процесс слияний замораживается и $N \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} N(\tau_{\text{as}})$. Для покоящегося облака астрозолей такой эффект не наблюдается, поскольку $N(t) \sim t^{-1}$.

В работе (Анисимов, Пискунов, 1990) получено автомодельное решение сформулированных выше уравнений для разлета плоского слоя, который в начальный момент покоился и был однородным по глубине. Показано, что в глубь слоя бежит затухающая волна разгрузки, внутри которой разрежение происходит настолько быстро, что наступает «закалка» спектра частиц. Проверено, что за счет оттока энергии, обусловленного коагуляцией, слой разлетается медленнее, чем в адиабатическом случае. Полученное автомодельное решение может использоваться и для сферического или цилиндрического облака, если интересоваться разлетом периферийных областей.

Глава 4

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ ЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ИНТЕГРАЛЬНОГО ПОДХОДА

Младенец кашку составляет
Из манных зерен голубых.
Зерно, как кубик, вылетает
Из легких пальчиков двойных.
Зерно к зерну — горшок наполнен,
И вот, качаясь, он висит,
Как колокол на колокольне,
Квадратной силой знаменит.

Н. Заболоцкий. Незрелость

Применение блока расчета кинетики коагуляции в составе трехмерных численных комплексов, описывающих формирование и перенос атмосферных загрязнений (Марчук и др., 1990), требует максимального снижения трудоемкости расчетов. При численном решении кинетического уравнения (3.1) обычно используется разностная аппроксимация на некоторой постоянной во времени сетке по массам частиц g , позволяющая находить концентрации частиц (спектр) C в интервалах сетки (Twomey, 1966; Berry and Reinhardt, 1974; Волощук, Седунов, 1985; Piskunov et al., 1997). Число интервалов сетки J должно быть достаточно большим, чтобы передать все детали поведения спектра и его интегральных характеристик. В нашей практике расчетов требуемые значения $J \approx 70-100$ (Пискунов и др., 1996; Piskunov et al., 1997).

Но во многих прикладных задачах физики дисперсных систем достаточно знать интегральные характеристики спектра частиц C без детальной информации о самой функции распределения $C(g, t)$ по массам g . Подход, в котором поведение дисперсной системы моделируется с использованием интегральных величин, должен дать значительный выигрыш в скорости расчетов. При этом, наиболее трудоемким для моделирования является процесс коагуляции.

В работах (McGraw, 1997; Barrett and Webb, 1998; Пискунов, Голубев, 1999; Piskunov and Golubev, 2002; Piskunov et al., 2002)

предложены новые методы численного моделирования кинетики коагуляции, основанные на применении интегральной формы кинетического уравнения и пригодные для описания средних по спектру величин. В этих работах используется та или иная аппроксимация возникающих интегралов путем суммирования с некоторыми весами значений спектра в узлах плавающей сетки. Так, например, в работе (McGraw, 1997) вводятся квадратурные формулы Гаусса для вычисления моментов функции распределения, в работе (Barrett and Webb, 1998) при вычислении координат узлов производится переход к безразмерной сетке и на ней используются стандартные квадратурные формулы. В работах (Пискунов, Голубев, 1999; Piskunov and Golubev, 2002; Piskunov et al., 2002) нами используется аппроксимация спектров обобщенными δ -функциями с «плавающими» значениями масс частиц и дальнейшая свертка с линейно независимыми гладкими функциями (в дальнейшем мы будем применять для этого подхода обозначение «ГА-метод»). Как показано ниже, подходы работ (McGraw, 1997; Пискунов, Голубев, 1999) близки по математической формулировке, но существенно отличаются в численной реализации, а также различны по наглядности и способу обоснования метода.

В (Пискунов, Голубев, 1999; Piskunov and Golubev, 2002; Piskunov et al., 2002) нами показано, что ГА-метод не только правильно воспроизводит аналитические результаты, полученные ранее для целого ряда модельных коэффициентов коагуляции, но и обнаруживает высокую эффективность при проведении расчетов с реальными коэффициентами коагуляции, используя небольшое число точек в разбиении спектра по массам частиц. Сравнение с асимптотическими закономерностями поведения интегральных величин, вытекающими из соображений автомодельности, подтверждает высокую точность метода вплоть до необычно больших значений безразмерного времени процесса. В настоящее время он рассматривается наряду с другими интегральными подходами в качестве перспективного способа моделирования кинетики формирования частиц совместно с процессами диффузии и переноса (Fox, 2006; Upadhyay and Ezekoye, 2006).

4.1. Формулировка подхода

Кинетическое уравнение можно записать в эквивалентной (3.1), но интегральной по массам частиц g форме (Волощук, 1984). Для этого умножим (3.1) на произвольную функцию $\varphi(g)$ и проинтегрируем по g :

$$d_t(C, \varphi) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \left[\varphi(g+s) - \varphi(g) - \varphi(s) \right] K(g, s) C(g, t) C(s, t) dg ds. \quad (4.1)$$

Здесь (C, φ) — скалярное произведение (свертка), а все интегралы предполагаются сходящимися. В том случае, когда функции φ являют-

ся степенями g , уравнение (4.1) превращается в бесконечную цепочку уравнений (3.2) для моментов $L_\alpha(t)$ функции $C(g, t)$ (см. разд. 3.1). Зная все целочисленные моменты, можно восстановить спектр $C(g, t)$ (проблема Стилтеса). К сожалению, для произвольных ядер $K(g, s)$ цепочка уравнений (3.2) не является замкнутой. В работе (Логинов, Лапига, 1978) предложен эмпирический способ аппроксимации интегралов в правых частях (3.2) через целочисленные моменты, который формально делает эту систему уравнений замкнутой. Однако с течением времени число уравнений, которое необходимо учитывать в (3.2), и трудоемкость расчетов катастрофически растут, что ограничивает практическое применение метода (Логинов, Лапига, 1978).

Мы уже отмечали, что многие моменты функции распределения частиц по размерам $C(g, t)$ имеют непосредственный физический смысл. Так, например, $N(t) = L_0(t)$ и $M(t) = L_1(t)$ — интегральные по спектру счетная и массовая концентрации частиц соответственно, а $\bar{g}(t) = M(t)/N(t)$ — средняя масса частиц в спектре. Из (3.2) видно, что в свободных, пространственно однородных коагулирующих системах массовая концентрация сохраняется: $M(t) = \text{const}$ (следствие сохранения массы при каждом слиянии), а счетная — убывает в соответствии с уравнением

$$d_t N(t) = -\frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty K(g, s) C(g, t) C(s, t) dg ds. \quad (4.2)$$

Информация о поведении $N(t)$ уже дает достаточно важные характеристики дисперсной системы. Однако уравнение (4.2) является замкнутым только для модельных ядер (3.22) с линейной зависимостью от аргументов. Пользуясь (4.2), легко получить явный вид $N(t)$ для этих ядер (см. разд. 3.3).

Попытаемся искать приближенное решение уравнения (4.2), исходя из предположения, что основной вклад в убыль счетной концентрации дают столкновения частиц со средней массой $\bar{g}(t)$:

$$d_t N(t) = -\frac{1}{2} K[\bar{g}(t), \bar{g}(t)] N^2(t), \quad \bar{g}(t) = \frac{M}{N(t)}. \quad (4.3)$$

Формально (4.3) можно получить, записывая спектр в виде $C(g, t) = \bar{C}(t) \delta[g - \bar{g}(t)]$ и подставляя это выражение в уравнения (3.2) для нулевого и первого моментов $N(t)$ и M . *Поразительно, но для всех модельных ядер (3.22) уравнение (4.3) дает решение $N(t)$, совпадающее с точным аналитическим ответом!* К сожалению, для ядер, равных нулю на диагонали $K(g, g) = 0$, уравнение (4.3) явно непригодно, так как из него следует, что $N = \text{const}$. Поскольку практически важные ядра гравитационной и турбулентной коагуляции (Saffman and Turner, 1956; Волощук, Седунов, 1975) содержат вклады, равные нулю

для одинаковых частиц, то аппроксимация интегральных величин в этом случае должна использовать несколько характерных размеров в спектре.

Обобщим намеченную выше процедуру получения замкнутых приближенных уравнений для интегральных характеристик спектра частиц (Пискунов, Голубев, 1999). Приближенное решение будем искать в виде набора δ -функций с зависящими от времени весами $C_i(t)$ и «плавающими» узловыми точками $g_i(t)$:

$$C(g, t) = \sum_{i=1}^I C_i(t) \delta[g - g_i(t)], \quad (4.4)$$

а для нахождения функций $C_i(t)$, $g_i(t)$ используем уравнения (4.1) с линейно независимыми функциями φ_m ($m = 1, 2, \dots, 2I$)

$$d_t \left\{ \sum_{i=1}^I C_i(t) \varphi_m[g_i(t)] \right\} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^I C_i(t) C_j(t) K[g_i(t), g_j(t)] \times \\ \times \left\{ \varphi_m[g_i(t) + g_j(t)] - \varphi_m[g_i(t)] - \varphi_m[g_j(t)] \right\}. \quad (4.5)$$

Стартовые значения для величин C_i , g_i задаются, исходя из характеристик начальных спектров. Правильное аналитическое выражение для $N(t)$ с ядрами (3.22) получается из (4.5) при произвольном значении $I \geq 1$. Разложение (4.4) и набор уравнений (4.5) являются базовыми для предлагаемого метода.

В обычном понимании аппроксимация непрерывного спектра в виде суммы δ -функций (4.4) является непривычной. Однако в обобщенном смысле это вполне приемлемое приближение, позволяющее правильно описывать поведение любых заранее выбранных интегральных величин (сверток). Выбор базисных функций φ_m может определяться либо типичными комбинациями, входящими в ядра, либо измеряемыми в экспериментах интегральными величинами, которые требуется воспроизвести в расчетах, либо конкретными функциональными зависимостями, используемыми затем для восстановления спектров. Поскольку величины $N(t)$ и M являются основными характеристиками любой дисперсной системы, то уравнения для них с базисными функциями $\varphi(g) = 1$ и $\varphi(g) = g$ обязательно должны входить в систему (4.5).

Этот подход в дальнейшем был развит в работах (Пискунов, Голубев, Исмаилова, 2000а; Пискунов, Голубев, Исмаилова, 2000б; Piskunov and Golubev, 2002; Piskunov et al., 2002) и получил название метода обобщенной аппроксимации (GA-метода). Конкретная реализация этого метода выполнена для базисных функций $\phi_n(g) = g^{\alpha_n}$. Легко

получить следующую связь между узловыми значениями $C_i(t)$, $g_i(t)$ из (4.4) и интегральными величинами $L_{\alpha n}(t)$:

$$\sum_{i=1}^I C_i(t) g_i^{\alpha n} = L_{\alpha n}(t) \quad (n = 0, 1, \dots, 2I - 1), \quad L_{\mu}(t) = \int_0^{\infty} g^{\mu} C(g, t) dg. \quad (4.6)$$

Для моментов $L_{\alpha n}(t)$ из (4.5) получим:

$$\begin{aligned} \frac{dL_{\alpha n}(t)}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^I C_i(t) C_j(t) K[g_i(t), g_j(t)] \times \\ \times \left\{ [g_i(t) + g_j(t)]^{\alpha n} - g_i^{\alpha n}(t) - g_j^{\alpha n}(t) \right\}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Уравнения (4.6), (4.7) используются для практической численной реализации ГА-метода. При любом числе узлов сетки I эти уравнения образуют замкнутую систему для вычисления $L_{\alpha n}(t)$, $C_i(t)$, $g_i(t)$ ($n = 0, 1, \dots, 2I - 1$, $i = 1, 2, \dots, I$). В качестве дополнительных условий используются значения моментов $L_{\alpha n}(t)$ в начальный момент времени.

Алгоритм решения уравнений (4.7) разработан А.И. Голубевым, детали численной реализации подхода описаны в (Пискунов, Голубев, Исмаилова, 2000а; Piskunov and Golubev, 2002).

4.2. Проверка асимптотического поведения интегральных величин для наиболее важных ядер коагуляции

Для иллюстрации работоспособности ГА-метода численно моделировалась кинетика коагуляции для следующих ядер, записанных в безразмерном виде

$$\begin{aligned} K_b(g, n) &= (g^{-1/3} + n^{-1/3})(g^{1/3} + n^{1/3}); \quad K_+(g, n) = (g^{2/3} + n^{2/3}); \\ K_g(g, n) &= (g^{1/3} + n^{1/3})^2 |g^{1/6} - n^{1/6}|. \end{aligned}$$

Отметим, что перечисленные ядра являются однородными, т.е. обладают свойством

$$K(rg, rn) = r^{\lambda} K(g, n). \quad (4.8)$$

Как мы видели в гл.3, показатель однородности λ является важной характеристикой, во многом определяющей поведение процесса коагуляции при $t \rightarrow \infty$. Напомним также, что в асимптотическом пределе $t \rightarrow \infty$ для однородных ядер спектры частиц $C(g, t)$ должны иметь автомодельный вид, инвариантный относительно масштабных преобразований (3.35):

$$C(g, t) = g_a^{-2}(t) \Psi(x), \quad x = g/g_a(t), \quad g_a(t) \sim t^{1/(1-\lambda)}, \quad \lambda < 1, \quad (4.9)$$

где $g_a(t)$ — масштаб подобия, определяющий растяжение по оси g .

Для практически важного ядра броуновской коагуляции в непрерывном режиме K_b параметр $\lambda = 0$. Функция Ψ найдена в (Friedlander and Wang, 1966), при этом имеет место асимптотика $N(t) \approx 0,4674/t$.

Ядро K_+ используется при описании процесса миграции и слияния частиц на нагретой подложке (см. разд. 3.2). Для него параметр $\lambda = 2/3$. Асимптотическое поведение коагулирующей системы с ядром K_+ исследовано в (Лушников, Пискунов, 1978), где показано, что автомодельная функция Ψ из (4.9) сингулярна в нуле:

$$\Psi(x) = \varphi(x)/x^\gamma, \quad \varphi(0) \neq 0, \quad 1 < \gamma < 2, \quad (4.10)$$

причем для ядра K_+ степень сингулярности $\gamma = 1,216$. Важно, что для этого типа ядер поведение масштаба подобия $g_a(t)$ не совпадает с поведением среднего размера частиц $\bar{g}(t) = M/N(t)$, в результате чего формируются сильно полидисперсные спектры. Это является прямым следствием сингулярного поведения $\Psi(x)$, описываемого зависимостью (4.10). В (Лушников, Пискунов, 1978) исследовано асимптотическое поведение спектра $C(g, t)$ и некоторых интегральных величин для ядра $K_+ : N(t) \sim t^{-a}$, $L_{2/3}(t) \approx a/t$, где $a = (2 - \gamma)/(1 - \lambda) = 2,351$.

Ядро K_g моделирует гравитационную коагуляцию крупных капель (см. разд. 3.2), для которой $\lambda = 5/6$. В этом случае запрещена коагуляция одинаковых частиц, однако, для немонодисперсных начальных спектров коагуляция протекает весьма интенсивно: $L_\alpha(t) \sim t^{-b}$, $b = (1 - \alpha)/(1 - \lambda) = 6(1 - \alpha)$. В частности, $N(t) \sim t^{-6}$.

Поскольку при больших значениях времени для ядер K_+ и K_g формируются сильно полидисперсные спектры, то реальное асимптотическое поведение $N(t)$ не согласуется с предварительной оценкой (4.3). Тем самым, расчеты для ядер K_+ , K_g важны для определения значений I в формуле (4.4), обеспечивающих приемлемую точность для самых разнообразных режимов коагуляции.

Расчеты показали, что метод быстро сходится при использовании базисных функций $\varphi_m(g) = g^{(m-1)/6}$, $m = 1, \dots, 2I$. Совпадение (с точностью 0,5% для K_b , K_+ и 5% для K_g) интегральных величин $N(t)$, $L_{1/3}(t)$, $L_{2/3}(t)$ с различными I достигается для всех перечисленных ядер при $I \geq 8$. В табл. 4.1 проиллюстрировано поведение численной концентрации $N(t)$ и координаты последней узловой точки $g_{\max}(t) = g_8(t)$ со временем. Начальный спектр брался логнормальным: с медианным параметром $g_{\text{med}} = 0,6065$ и значениями $N(0) = M = 1$.

Быстрый рост $g_8(t)$ со временем для ядер K_+ , K_g отражает сильную полидисперсность формирующихся спектров. В расчетах точки g_1 , g_2 , g_3 , g_4 обеспечивают основной вклад в численную концентрацию, а g_5 , g_6 , g_7 , g_8 — в массовую.

Результаты расчетов проиллюстрированы также на рис. 4.1, где показано поведение среднего размера $\bar{g}(t)$ со временем для перечисленных выше ядер коагуляции.

Т а б л и ц а 4.1. Результаты расчетов при $I = 8$ для $\varphi_m(g) = g^{(m-1)/6}$

Время t	Ядро K_b		Ядро K_+		Ядро K_g	
	$N(t)$	$g_8(t)$	$N(t)$	$g_8(t)$	$N(t)$	$g_8(t)$
0	1	1,450+2	1	1,450E+2	1	1,450E+2
1	3,186E-1	1,295E+2	4,675E-1	1,358E+2	7,277E-1	1,900E+2
10	4,434E-2	1,997E+2	2,432E-2	2,455E+3	4,701E-2	2,114E+3
100	4,630E-3	1,856E+3	1,726E-4	1,239E+6	1,943E-6	4,452E+7
1000	4,656E-4	1,847E+4	8,090E-7	1,097E+9	3,353E-12	2,585E+13
10000	4,659E-5	1,846E+5	3,625E-9	1,061E+12	3,524E-18	2,460E+19

Приемлемые по физическому смыслу результаты получаются до необычайно больших значений безразмерного времени процесса $t = 10^4$. Подчеркнем, что счетная концентрация $N(t)$ при этом меняется: для ядра K_b на четыре порядка; для ядра K_+ на восемь порядков; для ядра K_g на семнадцать порядков!

Иллюстрацией сильной полидисперсности спектра для коагуляции с ядром K_+ служит рис.4.2, где показано поведение со временем первой счетной точки $g_1(t)$, средней массы $\bar{g}(t)$ и последней точки $g_8(t)$ в двойном логарифмическом масштабе.

Видно, что поведение расчетных величин выходит на степенные зависимости, что обусловлено автомодельностью решения, заведомо наступающей при временах $t \sim 10^2 - 10^4$. При этом, первая точка очень слабо растет со временем, $\bar{g}(t)$ меняется по закону t^a с показателем степени $a = (2 - \gamma)/(1 - \lambda) = 2,351$, а степень роста последней точки превышает величину a . Эти результаты еще раз подтверждают выводы работы (Лушников, Пискунов, 1978) о сильной полидисперсности спек-

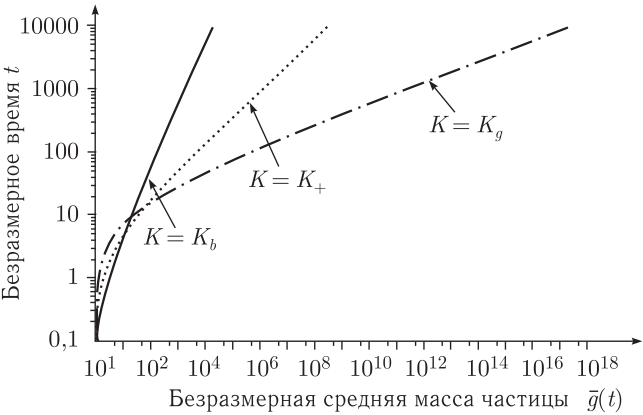


Рис. 4.1. Поведение средней массы частиц $\bar{g} = M/N$ со временем

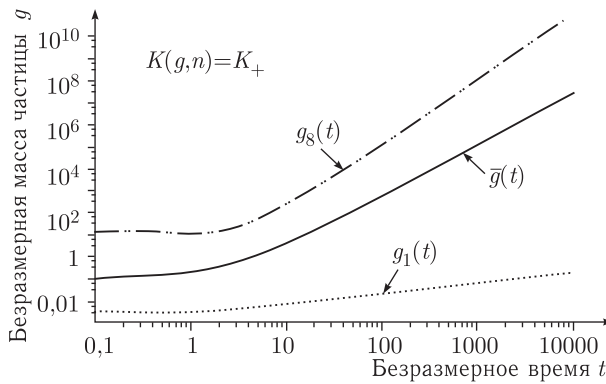


Рис. 4.2. Поведение характерных масс частиц со временем для ядра K_+

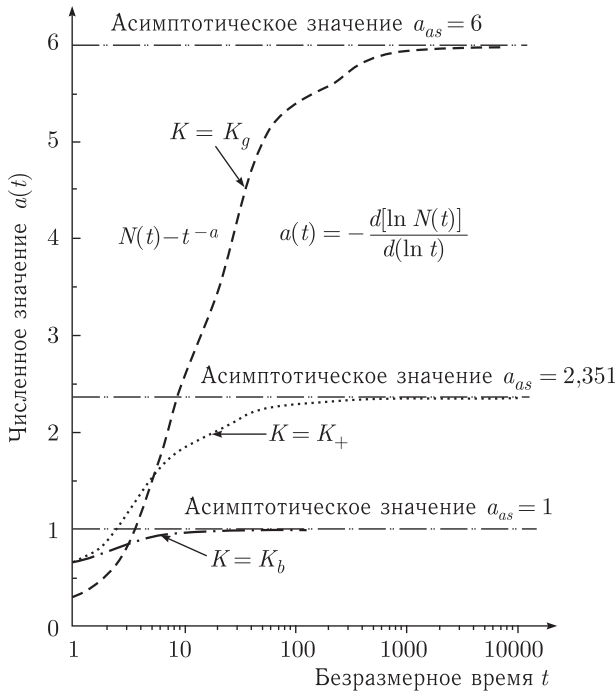


Рис. 4.3. Проверка работоспособности ГА-метода при больших временах

тра и о сингулярном поведении (4.10) автомодельной функции $\Psi(x)$ для ядра K_+ . Аналогичные рисунки показывают, что для ядер K_b , K_g реализуется иная картина, когда степени роста всех точек g_i в пределах каждого ядра совпадают. Это является следствием того, что для K_b и K_g реализуются несингулярные автомодельные режимы (см. ниже).

Результаты детальной проверки работоспособности и точности ГА-метода, а также эффективности его численной реализации при больших временах показаны на рис. 4.3, где для всех трех ядер K_b , K_+ и K_g проверены закономерности асимптотического поведения счетной концентрации $N(t) \sim t^{-a}$, вытекающие из гипотезы автомодельности (4.9). Для этого путем «разностного дифференцирования» результатов для близких моментов времени t и $t + \Delta t$ находилась производная $a = -\frac{d[\ln N(t)]}{d(\ln t)}$, определяющая показатели степенного роста $N(t)$.

Видно, что требуемые асимптотические закономерности в расчетах правильно воспроизводятся. Для ядер K_b и K_g происходит выход на обычный (несингулярный) режим (3.38). Так для ядра K_b за небольшие времена $t \sim 1-10$ устанавливается асимптотика $N(t) \sim t^{-1}$. Для ядра K_g зависимости более резкие: $N(t) \sim t^{-6}$, $L_{1/3}(t) \sim t^{-4}$, $L_{2/3}(t) \sim t^{-2}$, соответственно этому и гораздо больше времена выхода: $t \geq 1000$. Для ядра K_+ справедливы выводы работы (Лушников, Пискунов, 1978) о формировании полидисперсного спектра и видно, что за времена $t \sim 100-1000$ действительно формируется сингулярный режим (4.9), (4.10). Приведенные на рис. 4.3 результаты можно считать прямым доказательством аналитических выкладок и численных результатов работы (Лушников, Пискунов, 1978). Основным же выводом по ГА-методу можно считать подтверждение его работоспособности до рекордно больших значений безразмерного времени процесса $t = 10^4$. Таким образом, ГА-метод не только сокращает трудоемкость расчетов, но и существенно повышает точность результатов при автономном расчете длительных коагуляционных процессов.

4.3. Сравнение с сеточными методами

Основной целью расчетов, результаты которых изложены в (Пискунов, Голубев, Исмаилова, 2000б; Piskunov et al., 2002) и приводятся ниже, является определение эффективности численного алгоритма и оценка точности ГА-метода при различных значениях I -числа δ -функций в представлении (4.4). Поскольку на данный момент наиболее точными считаются сеточные методы с большим числом интервалов сетки J , то результаты, получаемые с помощью ГА-метода, в основном будут сравниваться с результатами работы (Piskunov et al., 1997), в которой непосредственно решается кинетическое уравнение для функции $C(g, t)$ на фиксированной сетке. Кроме того, большое количество результатов по сеточным методам приведено в работе (Barrett and Webb, 1998). В связи с этим, будет проведено сопоставление ГА-метода и с другими сеточными способами из (Barrett and Webb, 1998). Сравнение будет проводиться по результатам вычисления интегральных динамических параметров коагулирующей системы $L_p(t)$, значения которых в сеточных методах находятся путем суммирования средних

на интервале значений C с соответствующими весами, а в ГА-методе определяются из основной системы уравнений (4.7).

Во всех расчётах, если не оговорено противное, начальное распределение частиц полагается логнормальным:

$$C(g, t)|_{t=0} \equiv C_0(g) = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi} g \sigma} \exp \left\{ -\frac{\ln^2(g/g_0)}{2\sigma^2} \right\} \quad (4.11)$$

со значениями параметров, равными: $N_0 = 1$, $g_0 = \sqrt{3}/2$, $\sigma = \sqrt{\ln(4/3)}$. Значения N_0 , g_0 , σ выбраны теми же, что и в работе (Barrett and Webb, 1998), чтобы использовать для сравнения приведенные в ней результаты. Моменты распределения (4.11) имеют вид

$$L_{\alpha n} = \int_0^{\infty} g^{\alpha n} C_0(g) dg = N_0 g_0^{\alpha n} \exp \left(\frac{\alpha^2 n^2 \sigma^2}{2} \right) \quad (n=0, 1, 2, \dots, 2I-1).$$

Здесь α — числовой параметр; в дальнейшем мы будем полагать его для большинства расчетов $\alpha = 1/6$.

При численных расчетах по методу работы (Piskunov et al., 1997) уравнения, полученные в ней после дискретизации по переменной g , решались методом Рунге–Кутты. По переменной g использовалась сетка ω из работы (Piskunov et al., 1997), равномерная в логарифмической шкале. Это означает, что координаты узлов сетки связаны соотношением $\ln(g_{i+1}/g_i) = h$ или $g_{i+1} = g_i e^h$, где h — некоторая заданная величина, т. е. g_i расставлены по геометрической прогрессии.

Начальный спектр частиц задавался в интервале $0 \leq g \leq 10^3$; начальная сетка содержала J_0 узлов; при смещении спектра в область больших g добавлялись новые узлы с постоянным в логарифмической шкале шагом h . Количество вновь добавленных узлов соответствовало увеличению на порядок размера области по переменной g . Сравнение проводилось для разнообразных ядер коагуляции K , уже применявшихся нами в разд. 4.2, а также для интересного в практическом отношении ядра K_c , приводящего к критическим явлениям.

Броуновская коагуляция. Для безразмерного ядра броуновской коагуляции

$$K_b(g, n) = (g^{1/3} + n^{1/3})(g^{-1/3} + n^{-1/3})$$

сравнение будем проводить для моментов $L_0(t)$ и $L_2(t)$ (сравнение по величине $L_1(t) = M$ бессмысленно, поскольку значение M сохраняется со временем).

В табл. 4.2 в зависимости от безразмерного времени t приведены значения моментов L_0 , L_2 , полученные по методу работы (Piskunov et al., 1997) (AERFORM), по ГА-методу с $I = 7$, и по результатам работы (Barrett and Webb, 1998) (FEM). Для AERFORM-метода с целью

Таблица 4.2. Результаты вычислений для AERFORM-, GA-, FEM-методов

t	AERFORM						GA		FEM	
	$J_0 = 30$		$J_0 = 70$		$J_0 = 140$					
	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_2
0	1,00	1,40	1,00	1,34	1,00	1,33	1,00	1,33		
1	0,324	5,95	0,326	5,53	0,326	5,46	0,326	5,44	0,326	5,48
5	8,60–2	24,4	8,67–2	22,4	8,68–2	22,1	8,68–2	22,0	8,67–2	22,2
10	4,46–2	47,5	4,50–2	43,5	4,50–2	42,9	4,50–2	42,7	4,50–2	43,1
50	9,16–3	232,5	9,24–3	212,5	9,26–3	209,5	9,26–3	208,6	9,23–3	212
100	4,59–3	464,5	4,63–3	423,9	4,64–3	417,8	4,64–3	415,8	4,63–3	423

иллюстрации сходимости приведены результаты с начальным числом узлов J_0 сетки ω по g , равным 30, 70, 140. Для FEM-метода из работы (Barrett and Webb, 1998) взяты результаты, полученные на сетке с числом узлов $J_0 = 70$.

Различия при $t = 0$ в значениях L_2 для AERFORM-метода обусловлено погрешностью вычисления этого момента на сетке ω (Piskunov et al., 1997). Отметим, что результаты для AERFORM-метода с $J_0 = 70$ и $J_0 = 140$ хорошо согласуются между собой не только по значениям L_0 , но и по более чувствительному к выбору сетки ω моменту L_2 ; расхождение в нем не превышает 1,5%. Кроме того, эти результаты хорошо согласуются с результатами по FEM-методу (Barrett and Webb, 1998).

Различие результатов GA-метода от результатов AERFORM-метода с $J_0 = 70$ не превышает 0,2% для L_0 и меньше 2% для момента L_2 . Отметим, что для броуновского ядра коагуляции результаты для L_0 , L_2 в GA-методе мало чувствительны к выбору параметров α и I . Так, для $\alpha = 1/3$, $I = 4$ значения L_0 , L_2 полностью совпадают с приведенными в табл. 4.2.

Таким образом, для броуновского ядра коагуляции GA-метод хорошо согласуется с AERFORM-методом в широком временном интервале уже при небольших I ($I = 4-7$).

Коагуляция с ядром K_+ . Проведем сравнение GA-метода с AERFORM-методом для ядра коагуляции

$$K_+(g, n) = g^{2/3} + n^{2/3},$$

которое моделирует процесс миграции и слияния частиц на нагретой подложке. Результаты расчетов для AERFORM-метода с различным числом узлов J_0 приведены в табл. 4.3. Отметим, что для ядра K_+ спектр частиц к моменту времени $t = 100$ гораздо более полидисперсный, чем для ядра K_b . Граница g_k интервала по g , на котором набирается полная масса коагулирующих частиц, для него равна $g_k = 2,72 \cdot 10^6$

Таблица 4.3. Результаты вычислений
для AERFORM-метода

t	$J_0 = 70$		$J_0 = 140$	
	L_0	L_2	L_0	L_2
0	1,00	1,34	1,00	1,33
1	4,42 – 1	5,27	4,43 – 1	5,18
5	7,04 – 2	7,45 + 1	7,05 – 2	7,23 + 1
10	2,07 – 2	3,85 + 2	2,07 – 2	3,71 + 2
50	6,93 – 4	3,22 + 4	6,87 – 4	3,07 + 4
100	1,44 – 4	2,45 + 5	1,42 – 4	2,33 + 5

в отличие от $g_k = 3,17 \cdot 10^3$ для ядра K_b . Отметим, что в расчете с $J_0 = 140$ при $t = 100$ потребовалась сетка с числом узлов $J \cong 280$.

Из приведенных данных следует, что, как и для броуновского ядра коагуляции, значения момента L_0 слабо зависят от шага сетки по g . Для значений L_2 при $t = 10$ различие, в зависимости от J_0 , составляет $\sim 4\%$, а при $t = 100$ – примерно 5% .

GA-метод для этого ядра, как и для K_b , оказывается малочувствительным к выбору параметров α , I . В табл. 4.4 приведены результаты расчетов для $\alpha = 1/3, 1/6$ и при разных значениях I . В случае, когда $I < 1/2 + 1/\alpha$ приведены только значения $L_0(t)$, поскольку для таких I момент L_2 не участвует в расчете. Представленные результаты иллюстрируют быструю сходимость метода относительно числа слагаемых I в представлении спектра (3). Так, для момента L_0 и $\alpha = 1/3$ уже при $I = 2$ получаются результаты, имеющие хорошую точность.

Сравнение данных табл. 4.4 с данными табл. 4.3 при $J_0 = 140$ показывает, что расхождение в значениях $L_0(t)$ в этих таблицах составляет примерно $0,7\%$ при $t = 100$. Расхождение в результатах для $L_2(t)$ больше и для $J_0 = 140$ составляет примерно 1% при $t = 10$ и $1,7\%$ при $t = 100$.

Таблица 4.4. Результаты вычислений для GA-метода

t	$\alpha = 1/3$					$\alpha = 1/6$		
	$I = 2$	$I = 4$		$I = 8$		$I = 4$	$I = 8$	
	L_0	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_0	L_2
0	1,00	1,00	1,33	1,00	1,33	1,00	1,00	1,33
1	4,43–1	4,43–1	5,16	4,43–1	5,16	4,43–1	4,43–1	5,16
5	7,05–2	7,05–2	7,16+1	7,05–2	7,16+1	7,05–2	7,05–2	7,16+1
10	2,07–2	2,07–2	3,67+2	2,07–2	3,67+2	2,07–2	2,07–2	3,67+2
50	6,83–4	6,84–4	3,02+4	6,84–4	3,02+4	6,85–4	6,85–4	3,02+4
100	1,39–4	1,41–4	2,29+5	1,41–4	2,29+5	1,41–4	1,41–4	2,29+4

Таким образом, для ядра коагуляции K_+ ГА-метод хорошо согласуется с AERFORM-методом в широком временном диапазоне уже при небольших значениях I ($I = 4-7$).

Гравитационная коагуляция. Проведем теперь сравнение ГА-метода с AERFORM-методом для ядра коагуляции

$$K_g(g, n) = (g^{1/3} + n^{1/3})^2 |g^{1/6} - n^{1/6}|,$$

которое моделирует гравитационную коагуляцию крупных капель. Расчеты для ядра K_g проведены до значений $t = 100$. Результаты расчетов для AERFORM-метода с различным числом узлов J_0 приведены в табл. 4.5. Спектр частиц быстро становится полидисперсным. Граница g_k интервала по g , на котором набирается полная масса коагулирующих частиц, равна $g_k = 2,3 \cdot 10^6$ при $t = 40$ и $g_k = 5,4 \cdot 10^8$ при $t = 100$.

Т а б л и ц а 4.5. Результаты вычислений для AERFORM-метода

t	$J_0 = 70$		$J_0 = 140$		$J_0 = 280$	
	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_2
0	1,00	1,34	1,00	1,33	1,00	1,33
1	0,810	2,06	0,811	2,04	0,811	2,03
5	0,273	1,65+1	0,275	1,54+1	0,275	1,51+1
10	6,10-2	1,35+2	6,18-2	1,17+2	6,28-2	1,11+2
50	7,18-5	2,20+5	7,47-5	1,54+5	—	—
100	1,68-6	1,03+7	1,78-6	6,67+6	—	—

Из представленных данных следует, что значения $L_0(t)$ в случае гравитационной коагуляции так же, как и для других ядер, гораздо слабее зависят от выбора сетки по переменной g , нежели значения $L_2(t)$. Расхождение в $L_0(t)$ при $J_0 = 70$ и $J_0 = 140$ составляет $\sim 1,5\%$ при $t = 10$ и $\sim 6\%$ при $t = 100$; для $L_2(t)$ имеем расхождение 15% при $t = 10$ и $\sim 50\%$ при $t = 100$. В то же время для $t \leq 10$ расхождение результатов при $J_0 = 140$ и $J_0 = 280$ не превышает $1,6\%$ для $L_0(t)$ и $5,5\%$ для $L_2(t)$. Поэтому при сравнении с ГА-методом будем использовать результаты, полученные при $J_0 = 140$, хотя их точность при $t = 100$, по-видимому, невысока.

В табл. 4.6 приведены результаты расчетов по ГА-методу для $\alpha = 1/3$ и разных значений I .

Как видно из представленных данных, при рассмотренных значениях I не удастся получить устойчивые результаты для $L_0(t)$, $L_2(t)$ при $t > 10$. Более того, при $\alpha = 1/3$, $I = 12$ не удастся продлить расчет до времени $t \geq 20$ из-за сильного уменьшения шага Δt в методе Рунге-Кутты при решении обыкновенных дифференциальных уравнений. Отметим также, что для $\alpha = 1/3$ и $I = 8, 10$ при $t \geq 50$ начинают

Таблица 4.6. Результаты вычислений для GA-метода; $\alpha = 1/3$

t	$I = 4$		$I = 6$		$I = 8$		$I = 10$		$I = 12$	
	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_2
0	1,00	1,33	1,00	1,33	1,00	1,33	1,00	1,33	1,00	1,33
1	0,832	1,95	0,824	1,97	0,821	1,99	0,819	2,00	0,818	2,00
5	0,314	1,20+1	0,302	1,38+1	0,294	1,42+1	0,289	1,44+1	0,287	1,46+1
10	7,90-2	8,92+1	7,04-2	9,61+1	6,84-2	1,02+2	6,68-2	1,05+2	6,58-2	1,06+2
50	1,34-4	3,43+4	9,28-5	1,03+5	8,81-5	1,19+5	8,48-5	1,23+5	—	—
100	3,22-6	9,63+5	2,31-6	4,16+6	2,15-6	4,95+6	2,06-6	5,19+6	—	—

существенно проявляться погрешности вычислений, приводя к погрешности в значении полной массы коагулирующих частиц $\sim 0,01\%$ при $t = 100$.

Расчеты для значения параметра $\alpha = 1/6$ показывают, что этот набор базисных функций обеспечивает более устойчивую сходимость результатов с увеличением I , причем значение $I = 8$ дает вполне приемлемое совпадение результатов для счетной концентрации $N(t) = L_0(t)$. На рис. 4.4 для ядра K_g и начальных условий из работы (Пискунов, Голубев, 1999) показано поведение со временем величины $\delta(I, t) = N(I, t)/N(8, t)$, которая характеризует сходимость результатов с приближением I к значению $I = 8$ (тем самым, значения $I = 8$ и $N(8, t)$ приняты за номинальные).

При $I = 7-8$ можно констатировать хорошую точность результатов вплоть до безразмерного времени $t = 10^4$, однако, при $t = 10-300$ отмечается непонятный всплеск погрешности до $\sim 10\%$.

Результаты расчетов для $\alpha = 1/6$ и начальных условий (4.11) приведены в табл. 4.7.

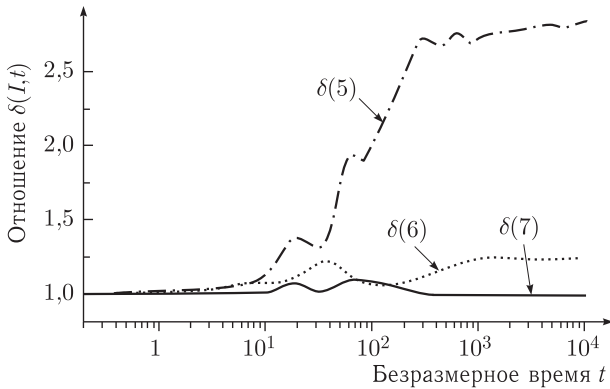
Рис. 4.4. Иллюстрация сходимости GA-метода с увеличением I для ядра K_g

Таблица 4.7. Результаты вычислений
для ГА-метода; $\alpha = 1/6$

t	$I = 4$	$I = 8$		$I = 10$	
	L_0	L_0	L_2	L_0	L_2
0	1,00	1,00	1,33	1,00	1,33
1	0,829	0,821	1,99	0,820	1,99
5	0,318	0,293	1,42+1	0,290	1,44+1
10	8,50-2	6,79-2	1,02+2	6,65-2	1,04+2
50	1,71-3	8,85-5	1,15+5	8,50-5	1,19+5
100	1,96-5	2,15-6	4,46+6	2,08-6	4,93+6

Из этих расчетов также следует, что результаты для значения $I = 8$ можно принять за номинальные.

Сопоставление результатов таблиц 4.5, 4.6, 4.7 показывает, что все результаты хорошо согласуются при $t \leq 10$. Так для значений $\alpha = 1/3$ и $\alpha = 1/6$ различие в $L_0(t)$ не превышает 2%, а отличие в $L_2(t)$, как ни странно, даже существенно меньше (см. таблицы 4.6, 4.7). Сопоставление данных из табл. 4.5 при $J_0 = 140$ и из табл. 4.7 при $I = 8$ показывает, что при $t \leq 10$ их расхождение не превышает 10% для $L_0(t)$ и 15% для $L_2(t)$. Следует отметить, что при $t > 10$ результаты расчета величины $L_2(t)$, полученные по ГА-методу, по-прежнему обладают неплохой точностью (см. табл. 4.7), а точность результатов по сеточному методу довольно небольшая (см. табл. 4.5 для различных J_0). По-видимому, это обусловлено сильной полидисперсностью спектров для ядра K_g , при этом постоянное разбиение с ограниченным J , используемое в сеточных методах, неизбежно вносит погрешности в скорости коагуляционных процессов, вычисляемые внутри фиксированных интервалов. Подчеркнем, что это ядро, в отличие от рассмотренных выше, является разностным, что и обуславливает сильную полидисперсность спектра и, как следствие, ухудшение сходимости методов.

Таким образом, в расчетах с гравитационным ядром коагуляции K_g ГА-метод дает наилучшие результаты для числа «плавающих» узлов $I \approx 8$ и набора базисных функций $\varphi_n(g) = g^{\alpha n}$ с $\alpha = 1/3$. При $t \leq 10$ ГА-метод сопоставим по точности с AERFORM-методом, а при $t > 10$ дает более надежные результаты. В целом, при автономном расчете длительных коагуляционных процессов, в результате которых формируются полидисперсные спектры, ГА-метод не только сокращает трудоемкость расчетов, но и существенно повышает точность результатов.

Моделирование для ядра, приводящего к критическим явлениям. Мы уже видели в разд. 3.5, что для ядер коагуляции с показателем однородности большим единицы решение кинетического уравнения, имеющее ограниченные моменты L , может существовать

лишь до некоторого времени t_c . Одно из таких ядер, моделирующее гравитационную коагуляцию частиц, движущихся в стоковом режиме, рассмотрено в разд. 3.2:

$$K_c(g, n) = (g^{1/3} + n^{1/3})^2 |g^{2/3} - n^{2/3}|.$$

Показатель однородности λ для ядра K_c равен $4/3$. В работе (Barrett and Webb, 1998) приведены результаты стандартного численного моделирования с ядром K_c , которое использует традиционное уравнение Смолуховского. Расчеты в (Barrett and Webb, 1998) проведены с использованием разных численных методов; начальный спектр выбран в виде (4.11). В работах (Домиловский, Лушников, Пискунов, 1978; Домиловский, Лушников, Пискунов, 1979) для исследования критических явлений использована вероятностная формулировка кинетического уравнения коагуляции, а для численных расчетов применен метод Монте-Карло (см. разд. 3.5). Показано, что в процессе коагуляции в некоторый момент времени t_c возникают критические явления, сопровождающиеся аномальным ростом величины $L_2(t)$. Значение t_c зависит от начальных условий и для исходного спектра в виде

$$C_0(g) = 0,5\delta(g - 1) + 0,25\delta(g - 2)$$

величина t_c находится в пределах $t_c = 0,5\text{--}0,8$. Неопределенность в значении t_c обусловлена как самим статистическим методом расчета, используемым в (Домиловский, Лушников, Пискунов, 1978; Домиловский, Лушников, Пискунов, 1979), так и необходимостью проведения расчетов для конечного ансамбля частиц с дальнейшим прогнозом поведения системы в бесконечности.

Результаты, которые дают AERFORM- и GA-методы для ядра K_c и начального распределения (4.11), приведены в таблицах 4.8–4.10.

Как видно из табл. 4.8, достаточно точные результаты по AERFORM-методу получаются лишь при $t \leq 0,5$ ($J_0 = 280$). Для

Т а б л и ц а 4.8. Результаты вычислений для AERFORM-метода

t	$J_0 = 70$		$J_0 = 140$		$J_0 = 280$	
	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_2
0	1,00	1,34	1,00	1,33	1,00	1,33
0,1	0,917	1,66	0,917	1,64	0,917	1,64
0,2	0,827	2,23	0,828	2,19	0,828	2,18
0,3	0,730	3,44	0,732	3,29	0,732	3,25
0,4	0,626	6,71	0,628	5,98	0,629	5,81
0,5	0,511	2,47+1	0,516	1,54+1	0,518	1,41+1
0,55	0,448	3,59+2	0,456	3,30+1		
0,60			0,392	1,31+2		

Таблица 4.9. Результаты вычислений для ГА-метода; $\alpha = 1/3$

t	$I = 4$		$I = 6$		$I = 8$		$I = 9$	
	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_2
0	1,00	1,33	1,00	1,33	1,00	1,33	1,00	1,33
0,1	0,926	1,60	0,923	1,61	0,922	1,62	0,921	1,62
0,2	0,847	2,06	0,841	2,10	0,838	2,12	0,837	2,13
0,3	0,761	2,94	0,752	3,06	0,746	3,11	0,746	3,12
0,4	0,668	4,94	0,656	5,28	0,650	5,41	0,648	5,45
0,5	0,565	1,07+1	0,550	1,21+1	0,543	1,26+1	0,540	1,27+1
0,55	0,509	1,78+1	0,494	2,22+1	0,485	2,34+1	0,483	2,37+1
0,6	0,450	3,24+1	0,433	5,21+1	0,425	5,72+1	0,422	5,87+1
0,65	0,386	6,39+1	0,366	2,01+2	0,358	3,58+2	0,354	8,92+2
0,7	0,318	1,30+2	0,285	2,54+3				

Таблица 4.10. Результаты вычислений
для ГА-метода; $\alpha = 1/6$

t	$I = 6$	$I = 7$		$I = 8$	
	L_0	L_0	L_2	L_0	L_2
0	1,00	1,00	1,33	1,00	,33
0,1	0,923	0,922	1,62	0,922	1,62
0,2	0,840	0,838	2,12	0,838	2,12
0,3	0,751	0,748	3,09	0,747	3,10
0,4	0,634	0,650	5,36	0,648	5,41
0,5	0,547	0,543	1,24 + 1	0,541	1,26 + 1
0,55	0,499	0,485	2,28 + 1	0,483	2,33 + 1
0,6	0,429	0,424	5,30 + 1	0,421	5,59 + 1
0,65	0,363	0,357	1,95 + 2	0,354	2,45 + 2
0,7	0,287	0,277	1,81 + 3	0,270	6,34 + 3
0,75	0,190	0,138	9,58 + 4		

расчета с $J_0 = 70$ шаг Δt в методе Рунге–Кутта сильно уменьшился при $t = 0,580$ и расчет был остановлен; аналогично, для $J_0 = 140$, 280 расчет был остановлен при $t = 0,6$. Из табл. 4.8 видно также, что момент $L_2(t)$ в этой задаче очень чувствителен к выбору сетки по g . Момент L_0 с уменьшением шага сетки по g меняется существенно меньше; так при $t = 0,55$ расхождение в результатах для L_0 не превышает 2% при переходе от $J_0 = 70$ к $J_0 = 140$.

Отметим, что при $\alpha = 1/3$ не удалось провести расчет для $I = 10$ вследствие сильного уменьшения шага Δt в методе Рунге–Кутта уже в начале расчета. Точно также не удалось провести расчет с $\alpha = 1/6$

и $I = 9$. Шаг Δt также сильно уменьшился в расчетах с $\alpha = 1/3$, $I = 8, 9$ при $t > 0,65$ и в расчете с $\alpha = 1/6$, $I = 8$ при $t > 0,7$, так что эти расчеты были остановлены.

Из данных таблиц 4.9, 4.10 видно, что при $t < 0,65$ результаты для $L_0(t)$ слабо зависят от α и значений I при $I \geq 6$. Для момента $L_2(t)$ аналогичный вывод справедлив при $t \leq 0,6$. Сравнение между результатами AERFORM-метода (см. табл. 4.8) и GA-метода с параметрами $\alpha = 1/6$, $I = 7$ (см. табл. 4.10) показывает, что при $t = 0,5$ отличие в $L_0(t)$ составляет примерно 5%, в $L_2(t)$ — примерно 14%.

Для сравнения с результатами других методов в табл. 4.11 приведены данные из табл. 4 работы (Barrett and Webb, 1998), полученные для ядра K_c по сеточным методам FEM, J-Space и интегрального метода QMOM (McGraw, 1997).

Таблица 4.11. Результаты расчетов для сеточных методов FEM, J-Space, QMOM (Barrett and Webb, 1998)

t	QMOM, $N_Q = 3$		FEM		J-Space	
	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_2
0	1,00	1,33	1,00	1,33	1,00	1,33
0,1	0,928	1,58				
0,2	0,853	1,99				
0,3	0,775	2,71	0,732	3,45	0,735	3,22
0,4	0,694	4,34				
0,5	0,612	9,51	0,511	2,75+1	0,520,	1,35+1
0,55	0,571	1,71 + 1				
0,6	0,530	3,64 + 1				
0,65	0,486	9,38 + 1				
0,7	0,432	2,96 + 2	0,179	3,47+3	0,25	$> 10^3$

Из сравнения таблиц 4.8 и 4.11 видно, что при $t = 0,5$ результаты J-Space-метода и AERFORM-метода с $J_0 = 280$ хорошо согласуются между собой, а результаты FEM-метода отличаются от них из-за использования меньшего числа узлов $J = 70$. Это подтверждается сравнением с результатами табл. 4.8 при $J_0 = 70$, поскольку наблюдается хорошее согласие между результатами FEM-метода и AERFORM-метода при одинаковом J . В целом, все три сеточных метода AERFORM, J-Space и FEM хорошо согласуются между собой при совпадающем числе узлов J .

Результаты GA-метода при $\alpha = 1$, $I = 3$ полностью совпадали с результатами QMOM-метода при $N_Q = 3$, как и должно быть по сути этих двух подходов. Однако, при $\alpha = 1$ нами не обнаружено хорошей сходимости результатов GA-метода с увеличением I , кроме того, прямое сравнение показывает, что при $\alpha = 1$ GA-метод дает

менее точные результаты, нежели при $\alpha = 1/3, 1/6$. По-видимому, это обусловлено сильным ростом целочисленных моментов $L_n(t)$ при больших n со временем t и в дальнейшем нами базисные функции $\phi_n(g) = g^{\alpha n}$ с $\alpha = 1$ не использовались. Сравнение результатов ГА-метода с $\alpha = 1/6, I = 7$ (см. табл. 4.10) с результатами J-Space-метода (см. табл. 4.11) показывает, что на момент времени $t = 0,5$ отличие в $L_0(t)$ для ГА-метода составляет примерно 5%, а в $L_2(t)$ — примерно 9%. При $t = 0,7$ отличие в $L_0(t)$ возрастает до 11%.

Аналитические решения и численные расчеты для ядер коагуляции, приводящих к критическим явлениям, показывают (Домиловский, Лушников, Пискунов, 1978; Домиловский, Лушников, Пискунов, 1979), что значение критического момента времени t_c сильно зависит от конкретного вида начального спектра $C_0(g)$. Поэтому, в заключение этого раздела приведем результаты расчетов по ГА-методу для начального распределения

$$C_0(g) = 0,5\delta(g - 1) + 0,25\delta(g - 2),$$

чтобы иметь возможность провести прямое сравнение с оценками, полученными по методу Монте-Карло (Домиловский, Лушников, Пискунов, 1978; Домиловский, Лушников, Пискунов, 1979) для этого начального спектра $C_0(g)$. В табл. 4.12 представлены результаты расчетов по ГА-методу для $\alpha = 1/3, \alpha = 1/6$ и различных I .

Из представленных в табл. 4.12 данных следует, что до $t \leq 0,5$ результаты для $L_0(t)$ и $L_2(t)$ слабо зависят от α и I . Отметим, что расчеты с $\alpha = 1/3, I = 5$, и с $\alpha = 1/6, I = 7, 8$ были остановлены после моментов времени, указанных в табл. 4.12, вследствие сильного уменьшения шага Δt в методе Рунге–Кутты. Наиболее важным является то, что значения $L_2(t)$, начиная с $t = 0,55$, сильно возрастают с увеличением t (см. таблицы 4.9, 4.10, 4.12). Это время согласуется с t_c , полученным методом Монте-Карло. По-видимому, для ядра K_c в ГА-методе происходит уменьшение шага именно при стремлении $t \rightarrow t_c$, что позволяет использовать ГА-метод для сигнализации о критических явлениях, наряду с методом Монте-Карло (Домиловский, Лушников, Пискунов, 1978; Домиловский, Лушников, Пискунов, 1979).

Из сравнения данных, приведенных в таблицах 4.9, 4.12, видно, что для ядра K_c наблюдается сходимость метода с увеличением I . Хорошая точность результатов по поведению величин $L_0(t), L_2(t)$ при значениях времени $t < t_c$ получается уже с небольшим числом узловых точек I ($I \geq 4$). При $t \rightarrow t_c$ ГА-метод начинает сходиться медленнее с увеличением I , однако прямое сравнение с другими методами здесь не является показательным. Очевидно, что никакой из численных методов не может дать хороший результат в окрестности критической точки и, тем более, не может считаться верным при $t > t_c$, где само кинетическое уравнение коагуляции перестает работать.

Таблица 4.12. Результаты вычислений для ГА-метода

t	$\alpha = 1/3$						$\alpha = 1/6$					
	$I = 4$		$I = 5$		$I = 6$		$I = 4$	$I = 7$		$I = 8$		
	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_2	L_0	L_0	L_2	L_0	L_2	
0,0	0,75	1,50	0,75	1,50	0,75	1,50	0,75	0,75	1,50	0,75	1,50	
0,1	0,709	1,696	0,709	1,698	0,709	1,698	0,709	0,709	1,698	0,709	1,698	
0,2	0,661	2,030	0,661	2,039	0,660	2,043	0,661	0,660	2,044	0,660	2,044	
0,3	0,607	2,646	0,605	2,677	0,604	2,692	0,606	0,603	2,699	0,603	2,699	
0,4	0,545	3,952	0,541	4,041	0,539	4,085	0,543	0,538	4,114	0,538	4,106	
0,45	0,511	5,213	0,506	5,365	0,504	5,442	0,508	0,501	5,497	0,502	5,439	
0,5	0,474	7,376	0,469	7,661	0,466	7,803	0,470	0,463	7,908	0,463	7,153	
0,55	0,435	11,45	0,429	12,08	0,425	12,38	0,431	0,421	12,59			
0,6	0,393	20,07	0,386	21,99	0,382	22,81	0,388	0,377	23,27			
0,65	0,347	41,18	0,339	50,56	0,335	54,65	0,342	0,329	55,70			
0,7	0,297	101,55	0,288	177,05	0,283	239,3	0,292	0,277	236,3			
0,75	0,240	296,95	0,226	1302,0	0,217	6290,0	0,239	0,211	5001,0			
0,8	0,174	927,77	0,129	24305,0			0,181					
0,85	0,105	2459,4					0,125					
0,9	0,0495	4473,5					0,077					
0,95	0,0196	5815,2					0,043					
1,0	0,0072	6399,7					0,023					

4.4. Сравнение с другими интегральными методами

Основной целью сравнения интегральных методов в этом разделе будет являться определение приемлемого числа узловых точек I , обеспечивающих инженерную точность расчетов при небольших временах процесса $t < 1-10$, а также определение реальной трудоемкости расчетов по каждому методу. Именно эти параметры определяют пригодность методов с точки зрения использования в составе сложных двух-, трехмерных комплексов, описывающих формирование и перенос атмосферных загрязнений.

Раньше уже отмечалось, что ГА-метод близок к другому интегральному методу QMOM работы (McGraw, 1997) по математической формулировке, но несколько отличается в численной реализации. Сравнение результатов, проведенное в разд. 4.3 для ГА-метода с $\alpha = 1$ и $I = 3$ и QMOM-метода с числом узлов $N_Q = 3$ обнаружило полное совпадение результатов, как и должно было быть по сути этих двух подходов. Дальнейшее сравнение нами не проводилось, поскольку QMOM-метод весьма громоздок и не позволяет получить эффективный численный алгоритм для больших N_Q (в работе (McGraw, 1997) приведены явные

формулы только при $N_Q \leq 3$), а набор базисных функций $\phi_n(g) = g^{\alpha n}$ с $\alpha = 1$ для ГА-метода не является оптимальным.

Как уже упоминалось ранее, один из интегральных методов, использующий переход к безразмерной сетке и использование на ней стандартных квадратурных формул, описан в (Barrett and Webb, 1998). При проведении сравнения с методом из работы (Barrett and Webb, 1998) будем использовать для него обозначение LQ (Laguerre Quadrature). Расчеты по LQ-методу выполнены с тремя узлами, расчеты по ГА-методу — с $I = 4$, $\alpha = 1/6$. Результаты расчетов момента $L_0(t)$ приведены в табл. 4.13; в ней также представлены результаты по ГА-методу и для $I = 8$ с целью оценки точности вычислений $L_0(t)$ для $I = 4$.

Таблица 4.13. Результаты вычислений для LQ- и ГА-методов

Вре- мя	Ядро K_b			Ядро K_+			Ядро K_g		
	LQ	GA		LQ	GA		LQ	GA	
t		$I = 4$	$I = 8$		$I = 4$	$I = 8$		$I = 4$	$I = 8$
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	3,268–1	3,263–1	3,263–1	4,480–1	4,430–1	4,430–1	8,067–1	8,290–1	8,214–1
10	4,604–1	4,506–2	4,506–2	1,970–2	2,073–2	2,073–2	—	8,500–2	6,793–2
100	4,801–3	4,645–3	4,645–3	—	1,409–4	1,409–4	—	1,960–5	2,144–6

По LQ-методу для ядра K_+ удалось получить результаты только для $t \leq 20$, а для ядра K_g — для $t \leq 2$. Для больших t этот метод оказался непригодным. Причина выхода из строя LQ-метода для ядер K_+ , K_g заключается в том, что в нем узлы квадратурных формул со временем меняются подобно. Поскольку для ядра K_+ поведение спектра частиц в начале и конце спектра различается, а для ядра K_g важно правильно описать область близких масс частиц, то применение LQ-метода для расчетов с ядрами K_+ и K_g оказывается проблематичным.

Из представленных данных видно, что для ядер K_b , K_+ ГА-метод с $I = 4$ дает те же результаты, что и с $I = 8$; для ядра K_g разница существенна и составляет 25% при $t = 10$ и почти порядок при $t = 100$. Отличие результатов LQ-метода и ГА-метода с $I = 4$ незначительно и не превышает 3% для K_b , 5% для K_+ и 3% для K_g для тех t , где работает LQ-метод.

Обратимся теперь к сравнительной оценке трудоемкости ГА- и LQ-методов. Вычислительное время в ГА-методе сильно возрастает с ростом I ; так, для ядра K_g расчет с $I = 5$ до $t = 1$ требует в 3 раза больше времени, а с $I = 8$ — в 12,5 раз больше, чем с $I = 4$. Сравнение LQ- и ГА-метода с $I = 4$ по вычислительным затратам проводилось на примере задачи, в которой вычисление зависимости $L_0(t)$ до $t = 1$ проводилось 2000 раз. Это сравнение показало, что для

ядра K_b ГА-метод в 1,8 раза дороже LQ-метода, а для ядра K_g — дороже всего в 1,2 раза. Таким образом, можно ожидать, что для реалистичных ядер коагуляции, более сложных, чем K_g , эти методы будут по вычислительным затратам примерно одинаковы.

В целом, сравнение двух численных методов (LQ and GA) показывает, что оба они представляют перспективу для математического моделирования кинетики коагуляции в составе сложных трехмерных программ. LQ-метод несколько экономичней, но ограничен по динамическому времени процесса t . ГА-метод обладает большей точностью и универсальностью, но чуть более трудоемок по затратам машинного времени.

4.5. Применение интегрального подхода для совместного моделирования кинетики коагуляции и конденсации

В соответствии с уравнением (2.9) и его дальнейшей интерпретацией, убыль частиц за счет их полного испарения определяется локальной величиной — потоком $C(0)v(0)$ (здесь $v(g)$ — скорость конденсации). По этой причине при расчете коагуляции совместно с процессом конденсации не удастся обойтись только интегральными величинами. В задаче можно использовать метод расщепления по физическим процессам, рассчитывая процесс коагуляции по ГА-методу с плавающими точками $g_i(t)$, а затем использовать эти точки для расчета конденсации. В этом случае процесс полного испарения частиц воспроизводится при пересечении точками $g_i(t)$ границы $g = 0$ и дальнейшим их выбывании из игры.

Мы видели в предыдущем разделе, что ГА-метод обеспечивает хорошую точность описания динамических параметров уже при небольшом значении $I = 4$, но для правильного описания кинетики конденсации требуется большее число плавающих точек: $I \geq 10-20$. Основной причиной этого является необходимость изымать из расчета точки, попадающие в область $g_p \leq 0$ (полное испарение частиц), т. е. в расчетах кинетики конденсации требуется запас точек и постоянное их пополнение.

Тем самым, для перехода от расчета кинетики коагуляции к моделированию конденсации требуется процедура, по которой можно увеличить число узловых точек разбиения I и определить в них концентрации (спектры) частиц. В практических расчетах (Wright, 2000) эту проблему пытаются решить, применяя различные функциональные зависимости для аппроксимации спектров и вычисляя затем нужные значения в любых узловых точках. Результаты (Wright, 2000) и наши расчеты с восстановлением спектров частиц по значениям моментов L_m показывают, что ни одна из обычно используемых аппроксимаций не позволяет универсально воспроизводить все типовые спектры с удовлетворительной точностью. Основная трудность состоит в том,

что любая конкретная форма аппроксимации навязывает явный вид поведения или сингулярности спектра при $g \gg 1$ и при $g \rightarrow 0$, а заранее эти характеристики неизвестны ни теоретически, ни численно.

В связи с этим, опишем разработанный в (Piskunov and Povyshev, 2003; Пискунов, 2004а) алгоритм, по которому можно увеличить число узловых точек разбиения I и определить в них спектры частиц, сохраняя точные значения моментов L_m . При этом будем сопоставлять обобщенной аппроксимации (4.4) кусочно-непрерывные спектры, определенные на конечном промежутке $\Delta = [0, g_{\max}]$. При таком подходе не требуется знать поведение спектров при $g \gg 1$ и при $g \rightarrow 0$. Это существенно упрощает задачу — фактически требуется определение только дискретных величин $\tilde{C}_i$ на конечном числе интервалов $\Delta_i = [\tilde{g}_{i-1}, \tilde{g}_i]$, $i = 1 \dots, I$.

Итак, рассмотрим обобщенную аппроксимацию спектров $C(g, t)$ в виде набора I дельта-функций (4.4) с «плавающими» значениями масс частиц g_i и определим в соответствии с (4.6) $2I$ интегральных

момента $L_m(t) = \sum_{i=1}^I C_i(t) g_i^m$ для значений $m = 0, 1/6, \dots, (2I - 1)/6$.

По этим $2I$ интегральным моментам L_m построим спектр, состоящий из I полочек. Границы $[\tilde{g}_{i-1}, \tilde{g}_i]$ полочек и значения спектра $\tilde{C}_i$ внутри соответствующих отрезков Δ_i определим из $2I$ уравнений:

$$\sum_{i=1}^I \tilde{L}_m^i = L_m; \quad \tilde{L}_m^i \equiv \int_{\Delta_i} g^m n \tilde{C} dg = \frac{\tilde{C}_i}{m+1} (\tilde{g}_i^{m+1} - \tilde{g}_{i-1}^{m+1}); \quad (4.12)$$

$$\tilde{g}_0 = 0; \quad m = 0, 1/6, \dots, (2I - 1)/6.$$

Полочная аппроксимация дает не только интегралы по всему отрезку Δ , но и достаточно точные значения интегралов $\tilde{L}_m^i$ внутри отрезков Δ_i , причем ясно, что эти значения согласованы с точными интегралами

по всему спектру, поскольку $\sum_{i=1}^I \tilde{L}_m^i = L_m$. Такая интерпретация сразу дает ключ к процедуре многократного «размножения» точек:

— из $2I$ моментов L_m и I дельта-функций (4.4) строим по (4.12) I отрезков Δ_i с I кусочно-постоянными значениями спектра $\tilde{C}_i$;

— на каждом из построенных отрезков вычисляем частные моменты $\tilde{L}_m^i$ (всего их будет $I \cdot 2I = 2I^2$) и по ним определяем параметры I^2 дельта-функций, аналогичных (4.4). При этом новые значения C_k и g_k находятся из $2I^2$ уравнений:

$$\sum_{k=1}^I C_k g_k^m = \tilde{L}_m^i; \quad m = 0, 1/6, \dots, (2I - 1)/6; \quad i = 1, \dots, I. \quad (4.13)$$

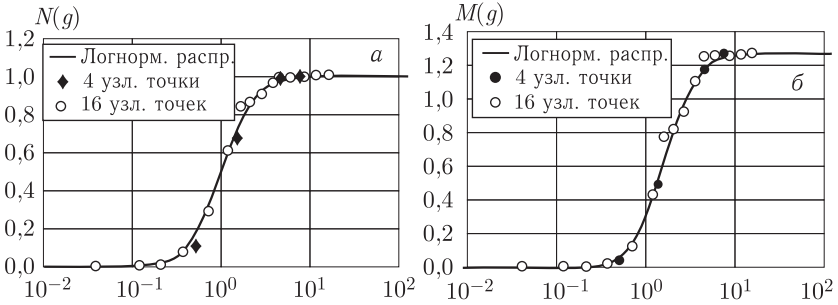
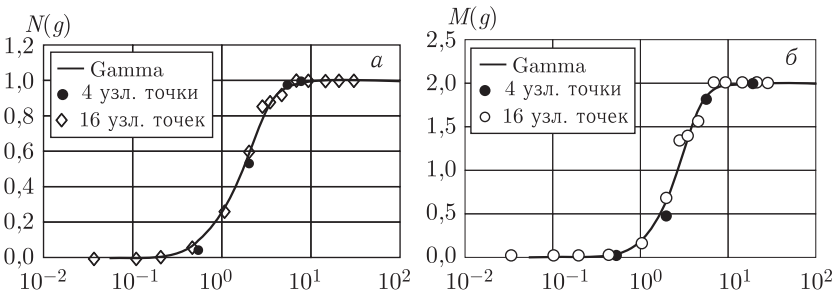


Рис. 4.5. Аппроксимация для логнормального спектра

Рис. 4.6. Аппроксимация для $C(g) = g e^{-g}$

Процесс можно продолжить, получая I^N дельта-функций на каждом шаге N . На практике достаточно использовать значения $I = 4$ и $N = 2$. Процедура увеличения числа точек проиллюстрирована на рис. 4.5, 4.6, где для логнормального распределения и спектра

$$C(g) = g e^{-g} \text{ приведены кумулятивные величины } N_{\text{cum}}(g) = \int_0^g C(g') dg'$$

и $M_{\text{cum}}(g) = \int_0^g C(g') g' dg'$. Видно, что добавление точек хорошо отвечает зависимостям для исходного непрерывного спектра.

Тем самым, данная процедура может использоваться также при решении обратной задачи — восстановления спектров частиц по их интегральным характеристикам (моментам).

Предложенная в (Пискунов, 2004а) численная реализация интегрального подхода к моделированию кинетики коагуляции/конденсации производилась следующим образом. Для расчетов кинетики коагуляции использовался GA-метод, для которого брались значения $I = 4$. Конденсация рассчитывалась методом частиц (Пискунов, 2000) со значениями $I = 4$ и $I = 16$. Описанный выше алгоритм пополнения числа точек $4 \rightarrow 16$ использовался при переходе от моделирования

коагуляции к конденсации (обратная перегруппировка точек производится тривиально). Итоговая программа, разработанная В.М.Повышевым, получила название AerosGA; проверка ее работоспособности проводилась на двух тестовых задачах.

В качестве первого теста использованы аналитические решения общего кинетического уравнения коагуляции/конденсации (3.4), полученные в разд. 3.3 для модельных ядер коагуляции $K(g, s) : K_c = 2$ и $K_+ = g + s$, и для монотонно растущих скоростей конденсации $v(g, t) = \beta(t)g$. Расчеты по программе AerosGA проведены для ядра K_+ и $\beta = \text{const} = 1$. Подчеркнем, что коагуляция с ядром K_+ приводит к сильно полидисперсным спектрам и по истечению безразмерного времени $t = 2,5$ средний размер меняется на шесть порядков! Именно поэтому данный тест является очень жестким. Сравнение

производилось для кумулятивных величин $N_{\text{cum}}(g, t) = \int_0^g C(g', t) dg'$ и $M_{\text{cum}}(g, t) = \int_0^g C(g', t) g' dg'$. До момента времени $t = 2,5$ программа

AerosGA дала совпадающие с аналитическим решением результаты для $N(t) = N_{\text{cum}}(\infty, t)$ с относительной точностью до 3%. Точность воспроизведения кумулятивных величин для различных g проиллюстрирована на рис. 4.7, 4.8. Существенно, что неустойчивостей или колебаний результатов в процессе расчетов по программе AerosGA не возникает.

Во второй тестовой задаче принято во внимание, что в реальных дисперсных системах скорости конденсации $v(g)$ отрицательны для малых размеров капель g и за счет этого происходит полное испарение мелких капель и уменьшение общей счетной концентрации $N(t)$ (см. разд. 2.7). Именно эта особенность использована в классической работе (Лифшиц, Слезов, 1958) для описания асимптотических режимов

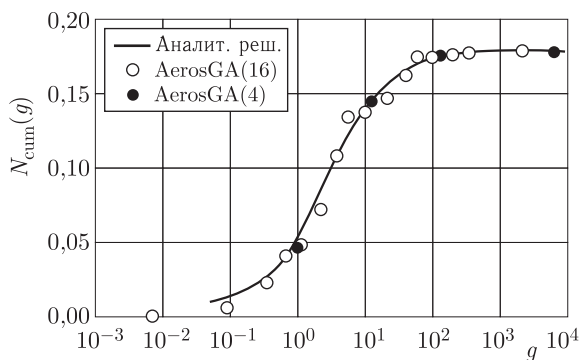
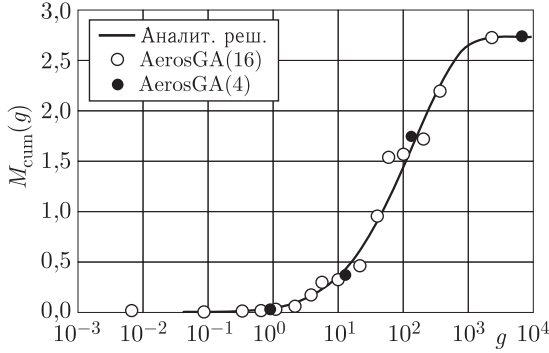


Рис. 4.7. Поведение $N_{\text{cum}}(g)$ при $t = 1$

Рис. 4.8. Поведение $M_{\text{cum}}(g)$ при $t = 1$

роста зерен новой фазы в пересыщенных твердых растворах. Рассмотрим модельную задачу из разд. 2.4, в которой скорость конденсации и имеет вид

$$v(g, t) = \chi \left(\frac{g}{g_*(t)} - 1 \right), \quad g_*(t) = \frac{1 - M(0)}{1 - M(t)}. \quad (4.14)$$

Здесь χ — константа; $M(t)$ — массовая концентрация; $g_*(t)$ — критический размер капель, для которого скорость роста $v(g)$ меняет знак. При этом концентрации пара и капель нормированы на финальное значение $M(\infty)$, а масса g — на стартовое значение массы критической капли $g_*(0)$. Зависимости (4.14) представляются достаточно реалистичными, поскольку для малых пересыщений и диффузионного режима подвода пара к каплям нужно только произвести замену $g_*(t) \rightarrow g_*^{1/3}(t)$. Аналитическое решение (2.41) кинетического уравнения конденсации для модели (4.14) получено в разд. 2.4 без учета коагуляции. Получим аналогичное решение для модели (4.14) и постоянных скоростей коагуляции $K(g, s) = K_c = 2Q$. Прямой подстановкой в кинетическое уравнение (3.4) можно убедиться, что в этом случае для начального спектра $C_0(g) = a \exp(-gb)$ решение имеет экспоненциальный вид для всех t :

$$C(g, t) = A(t) \exp[-gB(t)], \quad (4.15)$$

где $A(t) = au(t) \exp \left[-b\chi \int_0^t u(\tau) d\tau \right]$, $u(t) = \exp \left(-\chi \int_0^t \frac{d\tau}{g_*(\tau)} \right)$,

$B(t) = bu(t)$. Интегрируя спектр (4.15) по g , получим связь $A(t)$ и $B(t)$ со счетной $N(t)$ и массовой $M(t)$ концентрациями: $N(t) = A(t)/B(t)$; $M(t) = A(t)/B^2(t)$. Дифференциальные уравнения, определяющие

поведение $A(t)$ и $B(t)$ следующие:

$$\begin{aligned} d_t B(t) &= -\frac{\chi B(t)}{g_*(t)} - QA(t); \\ d_t A(t) &= -\chi A(t) \left[B(t) + \frac{1}{g_*(t)} \right] - \frac{2QA^2(t)}{B(t)}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Учитывая, что $u(0) = 1$, получим начальные условия для $A(t)$ и $B(t)$: $A(0) = a$, $B(0) = b$. Связь между $A(t)$, $B(t)$ и $g_*(t)$ согласно (4.14) следующая:

$$g_*(t) = \frac{1 - M(0)}{1 - A(t)/B^2(t)}. \quad (4.17)$$

Таким образом, для экспоненциального начального спектра $C_0(g) = a \exp(-gb)$ поведение системы полностью определяется решением двух дифференциальных уравнений (4.16) с начальными условиями $A(0) = a$, $B(0) = b$. Связь (4.17) служит для замыкания системы (4.16).

Расчеты проведены для $\chi = 1$, параметров начального спектра $a = 0,5$, $b = 1$ и коагуляции с $Q = 2$. Результаты приведены в табл. 4.14. Видно, что расчеты по программе AerosGA обнаруживают неплохое согласие с точным решением (4.16) — отличие для $N(t)$ и $M(t)$ не превышает 6%.

Таблица 4.14. Поведение основных величин для скорости конденсации (4.14) и коагуляции с постоянным ядром $Q = 2$

t		0	1	2	5	10	20	50
Расчет по (8)	$g_*(t)$	1	1,669	4,053	12,192	31,133	61,350	151,52
	$N(t)$	0,5	1,743—01	1,112—01	5,502—02	3,004—02	1,577—02	6,510—03
	$M(t)$	0,5	7,005—01	8,767—01	9,681—01	9,839—01	9,919—01	9,967—01
Расчет AerosGA	$g_*(t)$	1	1,672	3,975	11,745	27,949	60,314	158,73
	$N(t)$	0,5	1,787—01	1,156—01	5,660—02	2,993—02	1,520—02	6,225—03
	$M(t)$	0,5	7,009—01	8,742—01	9,670—01	9,839—01	9,921—01	9,969—01

В целом тестирование численных методов решения кинетического уравнения коагуляции/конденсации (3.4) на модели (4.14) является серьезной проверкой алгоритмов, поскольку требуется корректный расчет процесса полного испарения капель и большая точность расчета интегралов от спектра.

Так, например, прямое использование ГА-метода для решения общего уравнения (3.4) со скоростями $v(g)$ из (4.14) не дает приемлемого результата по следующим причинам:

— если в систему базисных функций включается $\varphi_0(g) = \text{const}$, то в уравнении для $N(t) = L_0(t)$ недостает граничного условия с потоком $C(0)v(0)$;

— если использовать для потока в нуле полочную аппроксимацию (4.12), то это приближение дает слишком неточный результат (искажение потока в несколько раз);

— если базисные функции начинать с $\varphi_p(g)$, где $p > 0$, то процесс полного испарения и поведение $N(t)$ воспроизводится очень неточно, поскольку система уравнений для моментов $L_m(t)$ фактически является незамкнутой.

Описанный в данном разделе материал позволяет реализовать интегральный подход к совместному моделированию кинетики конденсации и коагуляции. Эта реализация включает в себя: ГА-метод для решения уравнений коагуляции на плавающей сетке; метод частиц для расчета кинетики конденсации; описанный выше алгоритм размножения точек для переходов между расчетами коагуляции и конденсации. Работоспособность этого подхода проиллюстрирована для теста, имеющего аналитическое решение и дающего сильно полидисперсные спектры, а также на примере модельной задачи со знакопеременными скоростями конденсации. В целом предложенная реализация интегрального подхода эффективна и представляет собой перспективу для создания быстрого методов расчета кинетики формирования частиц в дисперсных системах.

4.6. Заключительные замечания к главе

Предложенный выше метод аппроксимации решений кинетического уравнения коагуляции набором обобщенных δ -функций с зависящими от времени весами и «плавающими» узловыми точками позволяет правильно описывать поведение интегральных динамических параметров коагулирующих систем, используя небольшое число узловых точек.

Сравнение с асимптотическими закономерностями поведения интегральных величин, вытекающими из соображений автомодельности, подтверждает работоспособность и высокую точность ГА-метода вплоть до необычно больших значений безразмерного времени процесса. В целом, при автономном расчете длительных коагуляционных процессов, в результате которых формируются полидисперсные спектры, ГА-метод не только сокращает трудоемкость расчетов, но и существенно повышает точность результатов.

Кроме того, ГА-метод сам по себе обладает большей точностью и универсальностью, чем другие методы решения кинетического уравнения коагуляции, следовательно, результаты расчетов по этому методу могут использоваться также и в методических целях. Например, для ядра K_c , приводящего к критическим явлениям, при стремлении $t \rightarrow t_c$ происходит уменьшение шага Δt , что позволяет использовать ГА-метод для сигнализации о критических явлениях, наряду с методом Монте-Карло.

Очень важно, что в рамках данного подхода легко учесть практически все сопутствующие коагуляции факторы: объемные источники

частиц, процессы самопроизвольного распада и вынужденного дробления, а также седиментация частиц. Для этого необходимо воспользоваться соответствующими модификациями (3.60), (3.70), (3.82), (3.91) кинетического уравнения (3.1) и перейти к их интегральным аналогам. Пример применения GA-метода для описания многокомпонентных систем будет приведен в следующей главе.

Данный метод может быть эффективно использован в качестве быстродействующего способа расчета средних параметров дисперсных систем в составе трехмерных комплексов, моделирующих формирование и перенос атмосферных загрязнений. Не исключено, что предложенная аппроксимация окажется полезной при решении других задач математической физики и механики, допускающих интегральную формулировку, аналогичную (4.1).

В заключение следует отметить принципиальные трудности, возникающие при совместном моделировании кинетики конденсации/коагуляции. Они связаны с локальным характером процесса полного испарения частиц и присущи всем интегральным подходам. Одним из приближенных способов устранения этих трудностей является процедура размножения точек при переходах от расчетов коагуляции к расчетам конденсации, предложенная в разд. 4.5. Данная процедура может использоваться также при решении обратной задачи — восстановления спектров частиц по их интегральным характеристикам (моментам).

Глава 5

ФОРМИРОВАНИЕ ЧАСТИЦ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМАХ

На меня нацелилась груша да черемуха —
Силою рассыпчатой бьет меня без промаха.
Кисти вместе с звездами, звезды вместе с кистями, —
Что за двоевластье там? В чем соцветьи истина?

О. Мандельштам

В реальных задачах физики дисперсных систем часто сталкиваются с необходимостью описания кинетики формирования композитных частиц, состоящих из смеси различных веществ. Сюда относятся, например, процессы формирования радиоактивных частиц при аварийных выбросах на объектах ядерной энергетики или при авариях с диспергированием ядерных материалов, процессы осаждения загрязняющих примесей на частицах аэрозольной компоненты земной атмосферы над сушей и океаном, процессы формирования кислотных осадков в атмосфере и т. д. При описании кинетики формирования композитных частиц зачастую важно иметь информацию не только об их распределении по размерам или по массе (спектре частиц), но и о содержании наиболее важных примесей в массовом спектре частиц. Например, для радиоактивных выбросов важно знать распределение активности частиц по их аэродинамическому диаметру, поскольку такая информация необходима для описания картины радиоактивных выпадений; для кислотных осадков необходимо знать процентное содержание кислоты в водяных каплях и т. д.

Другой, практически важной для многих видов дисперсных систем, является задача о формировании смешанных частиц, находящихся в двух фазовых состояниях (твердом и жидком). Особенно она актуальна для изучения динамики формирования и выпадения атмосферных осадков (Mason, 1957; Rogers, 1978; Prupacher and Klett, 1997). В облачных системах при отрицательных температурах обычно имеют дело со всеми фазовыми состояниями воды: твердым (лед, град, снежинки), жидким (капли) и газообразным (пар). Динамика пере-

ходов между этими фазами определяется конденсацией (испарением), промерзанием (таянием), а также коагуляцией частиц (капель).

При этом, кинетика формирования частиц в многокомпонентных системах по-прежнему определяется процессами конденсации и коагуляции, но моделирование этих процессов должно основываться на более сложных моделях, чем это было ранее. Эти модели разработаны в (Piskunov et al., 1995b; Пискунов, 1996; Пискунов и др., 1996; Piskunov, 1997; Piskunov et al., 1997a) и их содержание изложено в разд. 5.1. На основе результатов разд. 5.1 в разделах 5.2, 5.3 сформулированы кинетические уравнения для фазовых переходов в облачных системах и получены их аналитические решения для ряда модельных случаев (Пискунов, Петров, Голубев, 2001; Piskunov and Petrov, 2002; Piskunov, Petrov, Golubev, 2003). Реализация моделей кинетики формирования частиц в многокомпонентных системах в виде параметризационных зависимостей и подходов к численному моделированию будет изложена в гл. 6, результаты применения содержатся в гл. 7, 9 и в монографиях (Пискунов, 2000; Пискунов, 2004; Алоян, 2008).

5.1. Коагуляция композитных частиц

Для получения необходимой информации об изменении состава композитных частиц в результате коагуляции необходимо пользоваться более сложным кинетическим уравнением, чем стандартное уравнение Смолуховского. Если ограничиться рассмотрением двухкомпонентных смесей, то оно выглядит для пространственно однородного случая следующим образом (Лушников, 1977; Simons, 1981):

$$\partial_t C(g, \alpha, t) = S(C; g, \alpha, t), \quad (5.1)$$

где введено обозначение S для оператора Смолуховского, имеющего следующий вид:

$$S(C; g, \alpha, t) = \frac{1}{2} \int_0^g \int_0^\alpha K(g-s, \alpha-\beta; s, \beta) C(g-s, \alpha-\beta) C(s, \beta) ds d\beta - C(g, \alpha) \int_0^\infty \int_0^\infty K(g, \alpha; s, \beta) C(s, \beta) ds d\beta. \quad (5.2)$$

Здесь g — суммарная масса частицы; α — масса выделенной примеси. Остальные обозначения прежние. Коэффициенты коагуляции $K(g, \alpha; s, \beta)$ зависят в общем случае и от состава сталкивающихся частиц. В дальнейшем будем отдельно рассматривать: частицы, содержащие только примесь (например, радиоактивное вещество или кислоту); пассивную фракцию, содержащую только частицы балластного вещества (например, материалы теплоносителя, грунт, водяные капли и т. д.); композитную фракцию — из частиц со смешанным составом.

В общем случае решение кинетического уравнения (5.2) сопряжено со значительными трудностями, связанными с наличием дополнительной переменной α . При разработке численных методов требуется производить двойное разбиение по спектрам масс, что приводит к громоздким процедурам усреднения на интервалах и квадратичному росту времени расчетов, а при попытке получить аналитические результаты необходимо применять двойное преобразование Лапласа (Лушников, 1977), свернуть которое удастся лишь для постоянных ядер K (Simons, 1981; Park and Lee, 1988). В том случае, когда ядра коагуляции не зависят от наличия примеси в отдельных частицах, т. е. $K = K(g, s)$, удастся существенно упростить постановку и решение задачи (Simons, 1981). Интегрируя уравнение (5.2) по α , можно свести задачу к решению двух уравнений, аналогичных уравнениям Смолуховского. В качестве основных характеристик спектра используются следующие интегральные величины:

$$n(g, t) = \int_0^{\infty} C(g, \alpha, t) d\alpha; \quad m(g, t) = \int_0^{\infty} \alpha C(g, \alpha, t) d\alpha. \quad (5.3)$$

При этом подходе детали распределения примеси по композитным частицам скрадываются, однако средние параметры распределения легко восстанавливаются по величинам m и n . Так, например, средняя масса примеси в частице с общей массой g будет равна $\overline{\alpha(g, t)} = m(g, t)/n(g, t)$, а средняя массовая доля этих частиц $\overline{p(g, t)} = m(g, t)/gn(g, t)$.

На практике предположение о независимости K от содержания примеси в частицах выполняется далеко не всегда. С общей точки зрения ядра коагуляции зависят от геометрических размеров и плотностей сталкивающихся частиц. При значительном вкладе примеси в массу композитных частиц требуется корректный подсчет текущих плотностей частиц, поскольку материалы примеси обычно имеют плотности, резко отличающиеся от плотностей веществ, составляющих пассивную фракцию. Различие в плотностях частиц особенно существенно на начальной стадии процесса, когда идет интенсивное взаимодействие между частицами примеси и пассивной фракцией. Физически оправданным является учет среднего вклада примеси в плотности и геометрические размеры композитных частиц, описываемого величиной $\overline{\alpha(g, t)}$, и определение коэффициентов коагуляции для усредненных параметров (Пискунов, 1996)

$$K(g, \alpha; s, \beta) \cong K[g, \overline{\alpha(g, t)}; s, \overline{\beta(s, t)}] = K(g, s, t). \quad (5.4)$$

Такой подход позволяет исключить явную зависимость ядер коагуляции от аргументов α , β и пользоваться введенными выше величинами $m(g, t)$, $n(g, t)$ для подсчета текущих значений $K(g, s, t)$ в произвольном случае.

Особого внимания требует описание начальной стадии процесса формирования композитных частиц. Дело в том, что скорости процессов коагуляции с участием частиц примеси обычно значительно превышают скорости коагуляции композитных частиц между собой, поскольку в начальные моменты примесь практически всегда находится в очень мелкодисперсном состоянии и имеет большие счетные концентрации частиц. Для корректного учета этого обстоятельства явно выделим вклад частиц примеси в решение кинетического уравнения (5.2):

$$C(g, \alpha, t) = c(g, t) \delta(g - \alpha) + c_c(g, \alpha, t), \quad (5.5)$$

где $c(g, t)$ — концентрация частиц примеси; $c_c(g, \alpha, t)$ — концентрация композитных частиц. Вклад частиц пассивной фракции $c_p(g, t) \delta(\alpha)$ можно не выделять, включая эти частицы в композитные. Подставляя (5.5) в (5.2) и используя интегральные величины $m(g, t)$, $n(g, t)$ из (5.3), получаем следующую систему связанных уравнений (Пискунов, 1996; Пискунов и др., 1996; Piskunov, 1997; Piskunov et al., 1997):

$$\frac{\partial n(g, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^g K(g-s, s) n(g-s) n(s) ds - n(g) \int_0^\infty K(g, s) n(s) ds, \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial m(g, t)}{\partial t} = \int_0^g K(g-s, s) n(g-s) m(s) ds - m(g) \int_0^\infty K(g, s) n(s) ds, \quad (5.7)$$

$$\frac{\partial c(g, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^g K(g-s, s) c(g-s) c(s) ds - c(g) \int_0^\infty K(g, s) n(s) ds. \quad (5.8)$$

В работе (Simons, 1981) уравнения, аналогичные (5.6), (5.7), были получены только для композитных частиц и в предположениях, что содержание примеси в частицах мало, а ядра K не зависят от ее концентрации. Начальная стадия процесса при этом не рассматривалась. Система (5.6)–(5.8) обобщает результаты работы (Simons, 1981), описывая одновременно динамику коагуляции и поглощения самой примеси. При этом предположение (5.4) существенно расширяет пределы практической применимости данной модели кинетики коагуляции композитных частиц. Фактически (5.6)–(5.8) эквивалентны исходному уравнению (5.2), но предложенные нами уравнения гораздо проще для численного и аналитического решения.

Частным случаем (5.6)–(5.8) являются также уравнения, используемые для описания процесса кристаллизации ледяных частиц в переохлажденном облаке. В работе (Загайнов и др., 1988) рассматривается коагуляция капель воды (фаза 1, аналог частиц примеси) и ледяных кристаллов (фаза 0, аналог композитных частиц) и считается, что при слиянии частиц разных фаз сразу происходит их кристаллизация

(переход в фазу 0). Для описания этого процесса достаточно ограничиться только уравнениями (5.6), (5.8), а уравнение (5.7) не требуется, поскольку аналогом $m_c(g)$ служит величина $gn_c(g)$.

Для системы уравнений (5.6), (5.7) получен ряд аналитических решений (Simons, 1981; Park and Lee, 1988). Эти и любые другие аналитические результаты для уравнений (5.6), (5.7) можно использовать для получения решений более полной системы (5.6)–(5.8), пользуясь следующим утверждением (Piskunov, 1997):

Пусть $n(g, t)$ — решение (5.6) с начальным условием $n_0(g)$, а начальное распределение чистой примеси имеет вид $c_0(g) = n_0(g) \exp(-\beta g)$. Тогда общее решение (5.8) равно $c(g, t) = n(g, t) \exp(-\beta g)$.

В заключение исследуем асимптотическое поведение решений (5.6)–(5.8) при $t \rightarrow \infty$. Уравнение (5.6) полностью аналогично стандартному уравнению Смолуховского (3.1), поэтому его решения выходят на автомодельные распределения (3.45). Асимптотическое поведение при $g \gg 1$, $t \gg 1$ величин $m(g, t)$, удовлетворяющих уравнению (5.7) и условию нормировки $\int_0^\infty m(g, t) dg = I$, где I — сохраняющаяся суммарная концентрация примеси во всех частицах, следующее (Пискунов, 1996):

$$m(g, t) \approx \frac{N(t)I}{M} x\psi(x), \quad x = \frac{gN(t)}{M}, \quad \int_0^\infty \Psi(x)x dx = 1, \quad (5.9)$$

где $\psi(x)$ — та же самая функция, что и в (3.45). В справедливости этого можно убедиться прямой подстановкой (5.9) в (5.7).

Асимптотическое поведение при $g \gg 1$, $t \gg 1$ введенных ранее величин $\overline{\alpha(g, t)}$ и $\overline{p(g, t)}$ имеет вид: $\overline{\alpha(g, t)} \approx Ig/M$; $\overline{p(g, t)} \approx I/M$, т. е. в результате коагуляции примесь распределяется пропорционально полной массе композитных частиц, независимо от вида ядра K . Это весьма общий и важный вывод.

На практике отклонения от асимптотических формул могут наблюдаться в области малых размеров частиц, а также в том случае, когда коагулирующий объем расширяется настолько быстро, что процесс коагуляции «замораживается» из-за снижения концентраций частиц и условие $t \gg 1$ для эффективного времени коагуляции не выполняется (Анисимов, Пискунов, 1990). Кроме того, автомодельные распределения могут искажаться за счет процессов гравитационного выпадения, как это показано на примере постоянного ядра в работе (Московченко, Гладков, 1993). С методической точки зрения, полученные асимптотические распределения могут использоваться при калибровке численных методов для достаточно широкого круга практически важных ядер.

5.2. Уравнения кинетики формирования частиц с учетом фазовых переходов

Сформулированные выше уравнения для композитных частиц являются необходимым инструментом для описания кинетики формирования в облачных системах, осадки которых содержат воду и лед. В переохлажденных облаках капли воды могут находиться в метастабильном состоянии (вплоть до -40°C), причем попадание ледяных частиц или пылинок (иммерсионных ядер) на поверхность или в объем капли резко стимулирует процесс ее замерзания (Качурин, Морачевский, 1965). Поскольку появление иммерсионных ядер в каплях происходит в результате парных столкновений и коагуляции, то в реальных процессах необходимо одновременно учитывать не только все фазовые состояния воды, но и одновременное действие конденсации и коагуляции.

Основные результаты сформулированы ниже применительно к облачным процессам, но они практически без изменений переносятся на случай кинетики формирования произвольных частиц за счет процессов коагуляции и конденсации в многофазных системах.

Сначала для общности будем считать частицы осадков смешанными, т.е. составленными как из воды, так и из льда. Через $C(g, \alpha, t)$ обозначим концентрацию частиц с полной массой g и массой одного из компонентов (воды или льда) α на момент времени t . Ясно, что $\alpha \leq g$. Массообмен частицы с паром будем характеризовать скоростью испарения (конденсации) $d_t g = V(g, \alpha, t)$, а процесс формирования фазы — α -скоростью $d_t \alpha = U(g, \alpha, t)$. За счет коагуляции происходит изменение концентраций, описываемое уравнением (5.1). Пользуясь введенными выше величинами V и U , легко обобщить уравнение (5.1) на случай, когда происходят конденсация (испарение) и промерзание (таяние) частиц, а также имеются флуктуационные механизмы рождения капель и ледяных частиц, характеризующие интенсивностью J (Piskunov, 1999; Пискунов, Петров, Голубев, 2001; Piskunov and Petrov, 2002):

$$\partial_t C(g, \alpha, t) + \partial_g [V(g, \alpha, t) C(g, \alpha, t)] + \partial_\alpha [U(g, \alpha, t) C(g, \alpha, t)] = S(C; g, \alpha, t) + J(g, \alpha, t). \quad (5.10)$$

Для практического использования уравнений (5.10) целесообразно применить процедуру, изложенную в предыдущем разделе, чтобы свести эти уравнения к цепочкам одномерных уравнений, аналогичных уравнениям Смолуховского. Для этого, аналогично разд. 5.1, введем интегральные по переменной α характеристики спектра частиц $m(g, t)$, $n(g, t)$ и $\overline{\alpha}(g, t) = m(g, t)/n(g, t)$. Используем физически оправданное предположение, что ядра коагуляции K и скорости V , U зависят только от среднего содержания примеси в частицах:

$$K(g, \alpha; s, \beta) \cong K[g, \overline{\alpha}(g, t); s, \overline{\beta}(s, t)] \equiv k(g, s, t), \quad (5.11)$$

$$\begin{aligned} V(g, \alpha, t) &\cong V(g, \bar{\alpha}, t) \equiv v(g, t); \\ U(g, \alpha, t) &\cong U(g, \bar{\alpha}, t) \equiv u(g, t). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Интегрируя (5.10) от 0 до g по α (с весами 1 и α), получим замкнутую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \partial_t n(g, t) + \partial_g [v(g) n(g)] &= \frac{1}{2} \int_0^g k(g-s, s) n(g-s) n(s) ds - \\ &- n(g) \int_0^\infty k(g, s) n(s) ds + \int_0^g J(g, \alpha) d\alpha, \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} \partial_t m(g, t) + \partial_g [v(g) m(g)] - u(g) n(g) &= \int_0^g k(g-s, s) n(g-s) m(s) ds - \\ &- m(g) \int_0^\infty k(g, s) n(s) ds + \int_0^g \alpha J(g, \alpha) d\alpha. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Фазовый переход вода–лед не дает вклада в изменение полного числа частиц n , но за счет третьего члена в левой части (5.14) он влияет на поведение величин m и $\bar{\alpha}$, характеризующих среднюю степень промерзания (таяния) смешанных частиц в облаке. Уравнения (5.13), (5.14), полностью определяют поведение спектров, их численное решение может осуществляться путем расщепления по процессам конденсации и коагуляции (см. гл. 6).

При практическом использовании уравнений (5.13), (5.14) следует учитывать, что процедура использования средних по α величин фактически подразумевает, что компонента α присутствует в смешанных частицах в меньшем количестве. Поэтому, для задач промерзания водяных капель в облаке удобно считать, что компонента α является льдом, а для задач таяния — водой. Если дополнительно требуется аккуратное описание коагуляционного процесса для самой компоненты α , то можно воспользоваться приемом предыдущего раздела, чтобы получить для этой компоненты дополнительное к (5.13), (5.14) кинетическое уравнение.

Простые численные оценки показывают, что характерные времена формирования и роста капель в облаках составляют десятки-сотни минут, а процесс промерзания (таяния частиц) идет намного быстрее: время замерзания капли радиусом $R \sim 10^{-6}$ м составит 10^{-4} – 10^{-5} с, для $R \sim 10^{-4}$ м это время 0,1–1 с (Качурин, Морачевский, 1965), поэтому в упрощенной модели процесс промерзания каждой капли можно считать мгновенным. Тем самым, для облака в целом динамика перехода воды из жидкой в твердую фазу будет определяться внедрением ледяных частиц в капли, т. е. коагуляцией. Кроме того, важную

роль играет процесс перегонки пара от капель к ледяным частицам, который определяется конденсацией и испарением капель (ледяных частиц). Соответствующее кинетическое уравнение, учитывающее все эти процессы и обобщающее результаты работы (Загайнов и др., 1988), имеет вид, предложенный в (Piskunov, 1999):

$$\begin{aligned} \partial_t c_w(g, t) + \partial_g [v_w(g) c_w(g)] = & \frac{1}{2} \int_0^g k(g-s, s) c_w(g-s) c_w(s) ds - \\ & - c_w(g) \int_0^\infty k(g, s) n(s) ds + J_w(g, t), \end{aligned} \quad (5.15)$$

$$\begin{aligned} \partial_t c_i(g, t) + \partial_g [v_i(g) c_i(g)] = & \frac{1}{2} \int_0^g k(g-s, s) c_i(g-s) [c_i(s) + 2c_w(s)] ds - \\ & - c_i(g) \int_0^\infty k(g, s) n(s) ds + J_i(g, t). \end{aligned} \quad (5.16)$$

В этой упрощенной модели мы учитываем только два сорта частиц: водяные капли с концентрацией $c_w(g)$ и чисто ледяные частицы — $c_i(g)$, причем $n = c_w + c_i$.

Источники J_w и J_i в уравнениях (5.15) и (5.16) описывают изменение спектров водяных капель и ледяных частиц, например, в результате процессов нуклеации (Mason, 1957; Fletcher, 1962) или спонтанного промерзания водяных капель (Cotton, 1972; Shiino, 1978). Ядра коагуляции, вообще говоря, зависят не только от масс частиц, которые стоят в их аргументах, но и от характеристик вещества (например, от его плотности), поэтому каждому типу столкновений (вода–вода, лед–вода, лед–лед) соответствует свое ядро коагуляции (обозначим эти ядра K_{ww} , K_{iw} и K_{ii} соответственно). Для того, чтобы правильно учитывать эти зависимости и выбирать в (5.15), (5.16) нужные типы ядер коагуляции, проще всего следить за «сортом» частиц, присутствующих в интегралах парных столкновений. Например, в (5.15) в первом слагаемом берутся столкновения водяных капель с водяными (этим столкновениям соответствует ядро коагуляции K_{ww} , при этом g и s — массы водяных капель), а во втором — сначала водяных капель с ледяными частицами (этому соответствует ядро K_{wi} , при этом g — масса водяной капли, а s — масса ледяной частицы), а затем снова капель воды между собой (ядро K_{ww} , g и s — массы водяных капель). Однако, во избежание излишней громоздкости, мы опускаем в уравнениях (5.15), (5.16) индексы ядер коагуляции, обозначающие типы столкновений, считая, что это делается автоматически.

5.3. Аналитические решения кинетических уравнений

Для того, чтобы сделать возможным аналитическое решение сформулированных выше уравнений, сделаем ряд упрощающих предположений:

- отбросим источники J в уравнениях (5.15), (5.16);
- предположим, что скорости конденсации паров в водяную и ледяную фазу одинаковы;
- возьмем ядра коагуляции в уравнениях (5.15) и (5.16) одинаковыми для всех типов столкновений (вода–лед, лед–лед, вода–вода).

Кинетические уравнения для спектра капельной фракции $c(g, t)$ и полного спектра частиц $n(g, t)$ примут при этом следующий вид (Пискунов, Петров, Голубев, 2001; Piskunov and Petrov, 2002):

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(g, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial g} [v(g, t) c(g, t)] = \frac{1}{2} \int_0^g K(g-s, s, t) \times \\ \times c(g-s, t) c(s, t) ds - c(g, t) \int_0^\infty K(g, s, t) n(s) ds, \quad (5.17) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(g, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial g} [v(g, t) n(g, t)] = \frac{1}{2} \int_0^g K(g-s, s, t) \times \\ \times n(g-s, t) n(s) ds - n(g, t) \int_0^\infty K(g, s, t) n(s, t) ds. \quad (5.18) \end{aligned}$$

Уравнение (5.18) для полного спектра частиц $n(g, t)$ получено путем суммирования уравнений (5.15) и (5.16) и, естественно, представляет собой обычное уравнение Смолуховского с учетом процесса конденсации. Для получения общих результатов удобно произвести в уравнениях (5.17), (5.18) стандартный переход к безразмерным величинам (см. разд. 3.1): выбираем произвольную массу g_0 и переходим к безразмерным массам g/g_0 ; замена $c(g, t) \rightarrow c(g, t)/g_0 V_0$ осуществляет переход к безразмерным концентрациям, причем объем V_0 выбирается произвольно; выделение размерного множителя K_0 перед коэффициентами коагуляции позволяет перейти к безразмерным времени $K_0 t/V_0$ и скорости конденсации $v(g, t) V_0/K_0 g_0$. Введем интегральные величины:

$$\begin{aligned} N(t) &= \int_0^\infty n(g, t) dg; & M(t) &= \int_0^\infty n(g, t) g dg; \\ \nu(t) &= \int_0^\infty c(g, t) dg; & \mu(t) &= \int_0^\infty c(g, t) g dg. \end{aligned}$$

Здесь $N(t)$ и $M(t)$ — счетная и массовая концентрации всех частиц в облаке; $\nu(t)$ и $\mu(t)$ — аналогичные величины для водяных капель.

Аналитические решения уравнения (5.18) для однокомпонентных систем и ряда модельных ядер коагуляции K приведены в гл. 3. Ниже нас будут интересовать решения нового, более сложного уравнения (5.17), которые получены в (Пискунов, Петров, Голубев, 2001; Piskunov and Petrov, 2002) для следующих модельных зависимостей:

- начальный спектр $c(g, 0) = A \exp(-ag)$, где A и a — некоторые постоянные величины;
- скорость конденсации $v(g, t) = \beta(t)g$, где $\beta(t)$ — произвольная функция времени;
- ядра коагуляции трех видов: $K(g, s, t) = K_c = 2$; $K(g, s, t) = K_+ = g + s$; $K(g, s, t) = K_* = 2gs$.

Ядро $K_c = \text{const}$ хорошо воспроизводит поведение интегральных величин при броуновской коагуляции (Hidy and Brock, 1971). Ядром $K_+ = g + s$ часто аппроксимируют турбулентно-гравитационную коагуляцию (Головин, 1963; Hidy and Brock, 1971; Волощук, 1984), поскольку эти ядра имеют примерно одинаковую степень роста с увеличением размеров частиц. Ядро $K_* = 2gs$ приводит к критическим явлениям («gelation») в процессе коагуляции (см. разд. 3.5) и его изучение полезно в методических целях.

Подставляя начальное распределение $c(g, 0)$ в выражения для $\nu(t)$ и $\mu(t)$, получим следующие связи между константами: $\nu_0 = A/a$, $\mu_0 = A/a^2$ (здесь и далее индексом «0» обозначены начальные значения величин).

Для решения уравнения (5.17) нам понадобится поведение интегральных величин $M(t)$, $N(t)$. Интегрируя уравнение (5.18) по g от 0 до ∞ с весами g и 1, легко убедиться, что изменение полной массовой концентрации $M(t)$ определяется только конденсационны-

ми процессами: $M(t) = M_0 \exp\left(\int_0^t \beta(\tau) d\tau\right)$, а счетная концентрация

$N(t)$ убывает со временем. Для ядра K_c $N(t) = N_0/(1 + N_0 t)$ — поведение $N(t)$ не зависит от хода конденсационных процессов, а для ядра K_+ зависит косвенно — через изменение массовой concentra-

ции $M(t)$: $N(t) = N_0 \exp\left[-\int_0^t M(\tau) d\tau\right]$. Кроме очевидного случая

$\beta = \text{const}$ ($\beta > 0$ — конденсация, $\beta < 0$ — испарение) для физических оценок можно рассмотреть модель конденсации, в которой $\beta(t) = \gamma[M_s - M(t)]$, где M_s — значение $M(t)$ при насыщении пара. При этом $\gamma > 0$ — некоторая постоянная величина, а ход процесса определяет стартовое значение M_0 : если $M_0 < M_s$, то происходит

конденсация, если $M_0 > M_s$, то происходит испарение. Стремление $M(t)$ к равновесному значению M_s происходит следующим образом:

$$M(t) = \frac{M_0 M_s}{M_0 + (M_s - M_0) \exp(-\gamma M_s t)}. \quad (5.19)$$

Приводимые далее решения уравнения (5.17) получены с помощью преобразования Лапласа, аналогично тому, как это сделано в разд. 3.3.

Ядро $K_c = 2$. Решение уравнения (5.17) для спектра капель $c(g, t)$ наиболее компактно записывается в терминах интегральных и средних величин:

$$c(g, t) = \frac{\mu(t)}{\bar{g}^2(t)} \exp\left[-\frac{g}{\bar{g}(t)}\right]. \quad (5.20)$$

Поведение счетной и массовой концентраций капель следующее:

$$\nu(t) = \frac{\nu_0}{(1 + N_0 t)[1 + (N_0 - \nu_0)t]}, \quad \mu(t) = \frac{M(t)\mu_0}{M_0[1 + (N_0 - \nu_0)t]^2}. \quad (5.21)$$

В формуле (5.20) $\bar{g}(t) = \mu(t)/\nu(t)$ — средний размер (масса) водяных капель. Здесь, так же как в разд. 3.3, 3.4, поведение спектра определяется начальными значениями интегральных по спектру величин (здесь это параметры N_0 , M_0 , ν_0 , μ_0).

Видно, что с течением времени происходит необратимое вымораживание капельной фракции, поскольку ее относительное содержание в облаке $\eta(t) = \mu(t)/M(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$. Из (5.21) следует также, что при $M(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \text{const}$, как это имеет место, например, для решения (5.19), средний размер водяных капель стабилизируется: $\bar{g}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \text{const}$. Причиной столь необычного поведения $\bar{g}(t)$ служит тот факт, что изменение среднего размера капель обусловлено только столкновениями внутри водяной фракции, а подобное уменьшение спектра капель в (5.20), пропорциональное $\mu(t)$, обусловлено столкновениями капель с ледяными частицами и дальнейшим вымораживанием капель. Ясно, что в процессе вымораживания счетная концентрация капель убывает и стремится к нулю, за счет чего вероятность парных столкновений капель между собой резко снижается и происходит стабилизация формы спектра. При этом средний размер капель стремится к некоторой постоянной величине. Данную интерпретацию легко подтвердить прямой подстановкой решения (5.20) в различные интегральные слагаемые уравнения (5.17):

$$\begin{aligned} [\partial_t c(g, t)]_{ww} &= \int_0^g c(g-s, t) c(s, t) ds - 2c(g, t)\nu(t) = \\ &= c(g, t)\nu(t) \left[\frac{g}{\bar{g}(t)} - 2 \right] = \frac{\partial c(g, t)}{\partial \bar{g}} \frac{d\bar{g}(t)}{dt}, \end{aligned}$$

т.е. вклад в коагуляционном операторе $[\partial_t c(g, t)]_{ww}$, описывающий столкновения водяных капель с водяными, точно совпадает с производной спектра $\frac{\partial c(g, t)}{\partial g} \frac{d\bar{g}(t)}{dt}$, обусловленной только изменением среднего размера.

Если ледяная фракция отсутствует ($M_0 = \mu_0$, $N_0 = \nu_0$), то эффект стабилизации спектра пропадает и $\bar{g}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \infty$, как это и должно быть по физическому смыслу процесса коагуляции однотипных частиц; при этом счетная и массовая концентрации капель убывают гораздо медленнее, чем в присутствии ледяной фракции, экспоненциальный «хвост» спектра в (5.20) также реализуется гораздо медленнее, т.е. спектр капель в однокомпонентной системе более широкий.

Для иллюстрации этих закономерностей возьмем частный случай, когда $\nu_0/N_0 = \mu_0/M_0 = p$. Параметр $p \leq 1$ задает начальное относительное содержание капельной фракции в облаке. Когда $p = 1$ (нет ледяных частиц), то $\bar{g}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \infty$ и стабилизация формы спектра не наблюдается. При $p < 1$ происходит «вымерзание» водяной (капельной) фракции, причем тем быстрее, чем меньше значение p . Особенности поведения решений со временем при различных значениях p ($p = 1, 0,75, 0,5, 0,25$) наглядно представлены на рисунках 5.1–5.3. На рис. 5.1 проиллюстрирован монотонный рост относительной средней массы водяных капель $\bar{g}/\bar{g}_0$ при $p = 1$, т.е. в отсутствии в облаке ледяных частиц, и стремление $\bar{g}/\bar{g}_0$ к постоянной величине (стабилизация формы спектра) при значениях $p < 1$. Из физических соображений ясно, что стабилизация среднего размера начинается тем быстрее, чем меньше значение p , и это показано на примерах $p = 0,25$, $p = 0,5$ и $p = 0,75$.

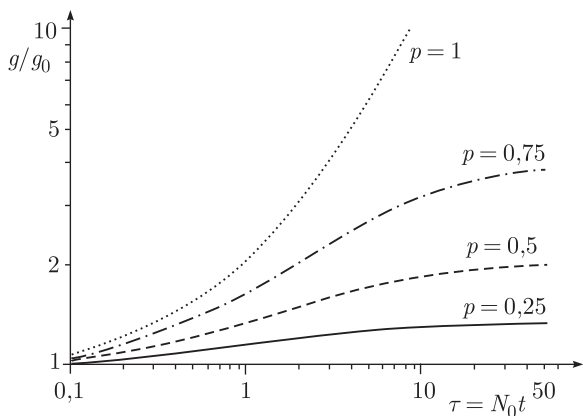


Рис. 5.1. Поведение относительной средней массы капель $\bar{g}/\bar{g}_0$ со временем для различных значений p . Параметр p — относительное содержание капельной фракции в начале процесса коагуляции

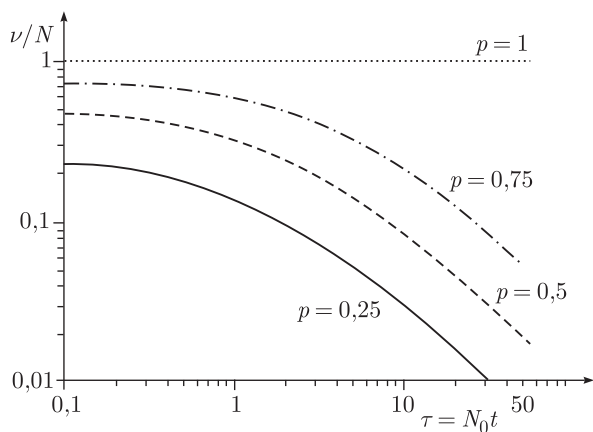


Рис. 5.2. Поведение со временем относительной численной концентрации водяных капель ν/N для различных значений p

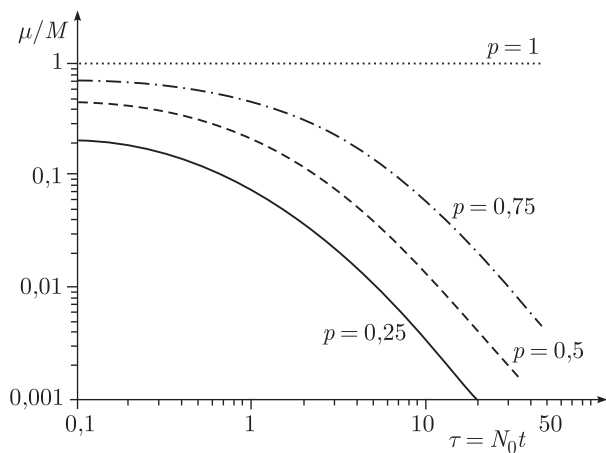


Рис. 5.3. Поведение со временем относительной массовой концентрации водяных капель μ/M для различных значений p

Рисунки 5.2, 5.3 иллюстрируют «вымерзание» водяной фракции со временем. На них изображено поведение относительной счетной концентрации водяных капель ν/N и относительной массовой концентрации μ/M . При $p = 1$ ледяных частиц в облаке не появляется, поэтому $\nu/N = 1$, $\mu/M = 1$ в течение всего процесса. При $p < 1$ величины ν/N и μ/M стремятся к нулю тем быстрее, чем меньше значение p , что наглядно видно из сравнения кривых, соответствующих $p = 0,25$, $p = 0,5$ и $p = 0,75$.

Ядро $K_+ = g + s$. Решение уравнения (5.17) имеет следующий вид:

$$c(g, t) = \frac{MN\sqrt{G}}{2g(N_0 - N)} I_1(g\sqrt{G}) \exp(-gF), \quad (5.22)$$

где $F \equiv \frac{aM_0 + N_0 - N}{M}$, $G \equiv \frac{4AM_0(N_0 - N)}{M^2 N_0}$, I_1 — функция Бесселя 1-го рода мнимого аргумента. Как и в разд. 3.3, 3.4, поведение спектра определяется начальными значениями интегральных величин (здесь N_0 , M_0 , a , A). Поскольку $F > \sqrt{G}$, спектр на «хвосте» всегда экспоненциально убывает. Поведение интегральных величин следующее:

$$\begin{aligned} \nu(t) &= \frac{MN}{2(N_0 - N)} (F - \sqrt{F^2 - G}); \\ \mu(t) &= \frac{\nu(t)}{\sqrt{F^2 - G}}; \quad \bar{g}(t) = \frac{1}{\sqrt{F^2 - G}}. \end{aligned}$$

Сделанные выше качественные выводы о динамике спектров для ядра K_c сохраняются и для ядра K_+ .

Критические явления для ядра $K_* = 2gs$. Для ядра K_* в некоторый момент времени t_c процесс коагуляции принимает лавинообразный характер, приводящий к отделению от спектра аномально крупной частицы (или группы частиц), не описываемой уравнением Смолуховского (Lushnikov, 1978). В ряде работ это явление получило название «gelation» (Ziff and Stell, 1980). Поведение однокомпонентной системы в этом случае подробно описано в (Piskunov, 1991), где использован термин «критические явления». Здесь нас будут интересовать критические явления в системах с двухкомпонентной дисперсной средой, которая, представляет собой смесь жидких капель и ледяных частиц. Для их исследования рассмотрим только кинетику коагуляции, не учитывая конденсационные процессы, несущественные для критических явлений. Запишем дискретные варианты уравнений (5.17), (5.18) с ядром $K_* = 2gs$, отбросив в этих уравнениях конденсационные члены:

$$d_t n_g(t) = \sum_{s=1}^{g-1} (g-s) s n_{g-s}(t) n_s(t) - 2n_g(t) \sum_{s=1}^{\infty} g s n_s(t), \quad (5.23)$$

$$d_t c_g(t) = \sum_{s=1}^{g-1} (g-s) s c_{g-s}(t) c_s(t) - 2c_g(t) \sum_{s=1}^{\infty} g s n_s(t). \quad (5.24)$$

Уравнение (5.23) для полного спектра частиц совпадает с уравнением, описывающим поведение спектра в однокомпонентном случае. Аналитическое решение этого уравнения получено и исследовано в разд. 3.5. Если взять монодисперсные начальные условия $n_g^0 = \delta_{g,1}$, то это реше-

ние имеет вид:

$$n_g(t) = \frac{(2tg)^{g-1} e^{-2gt}}{g!g}. \quad (5.25)$$

Из анализа решения (5.25) следует, что в критический момент времени $t_c = 1/2$ спектр становится степенным — $n_g(t_c) \approx g^{-5/2}/\sqrt{2}\pi$, а второй момент $L_2(t) = \sum_{g=1}^{\infty} g^2 n_g(t)$ при $t = t_c$ расходится. Кроме того, при $t \geq t_c$ нарушается баланс массовой концентрации: $M(t) = \sum_{g=1}^{\infty} g n_g(t) < M(0)$. Содержательная интерпретация этого противоречия заключается в предположении, что при $t > t_c$ в системе появляется аномально крупная частица, не описываемая уравнением Смолуховского (см. разд. 3.5). Такое поведение дисперсной системы классифицируется как наличие критических явлений (или выпадения в осадок) в процессе коагуляции.

Аналитическое решение уравнения (5.24) наиболее просто получить, взяв начальное условие для спектра водяных капель в виде: $c_g^0 = p^g n_g^0$ ($0 < p < 1$). Воспользуемся следующим свойством решений уравнений (5.23)–(5.24):

- пусть $n_g(t)$ — решения (5.23) с начальными условиями n_g^0 , а начальные условия для $c_g(t)$ имеют вид: $c_g^0 = p^g n_g^0$ ($0 < p < 1$);
- тогда функции $c_g(t) = p^g n_g(t)$ являются решениями уравнения (5.24).

Справедливость этого утверждения легко проверяется непосредственной подстановкой $c_g(t) = p^g n_g(t)$ в уравнение (5.24). Таким образом, решение уравнения (5.24) имеет вид:

$$c_g(t) = n_g(t) p^g = \frac{p^g (2tg)^{g-1} e^{-2gt}}{g!g}. \quad (5.26)$$

Из анализа (5.26) следует, что спектр $c_g(t)$ экспоненциально всегда убывает по g , следовательно, второй момент $l_2(t) = \sum_{g=1}^{\infty} g^2 c_g(t)$ всегда сходится и величина $\mu(t) = \sum_{g=1}^{\infty} g c_g(t)$ ведет себя регулярно. Таким образом, критические явления для «водяной» фракции $c_g(t)$ отсутствуют.

5.4. Применение ГА-метода для многокомпонентных систем

ГА-метод, описанный в гл. 4, без особых усложнений обобщается на случай коагуляции композитных частиц, состоящих из смеси нескольких веществ (Пискунов, Голубев, 1999). Если ограничиться рассмотрением двухкомпонентных смесей, то можно воспользоваться кинетическим уравнением (5.2). Уравнение (4.1) для свертка содержит

теперь дополнительное интегрирование по массам примеси. Аналогично (4.4) решение представляется в виде

$$C(g, \alpha, t) = \sum_{i=1}^I C_i(t) \delta[g - g_i(t)] \delta[\alpha - \alpha_i(t)]. \quad (5.27)$$

Получающиеся при этом уравнения для нахождения величин $C_i(t)$, $g_i(t)$, $\alpha_i(t)$ практически совпадают с уравнениями (4.5) и не приводятся здесь из-за их громоздкости.

Кинетические уравнения (5.6)–(5.8) для $n(g, t)$, $m(g, t)$, $c(g, t)$ также легко преобразовать в уравнения для сверток. Решение этих уравнений ищем в форме, аналогичной (4.4):

$$\begin{aligned} n(g, t) &= \sum_{i=1}^I n_i(t) \delta[g - g_i(t)], & m(g, t) &= \sum_{i=1}^I m_i(t) \delta[g - g_i(t)], \\ c(g, t) &= \sum_{i=1}^{IP} c_i(t) \delta[g - g_i(t)]. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Число узлов I сетки для функций n , m должно быть больше, чем число узлов IP сетки для c , поскольку частицы, состоящие из одной примеси, составляют только долю всех частиц. Подстановка (5.28) в уравнения для сверток приводит к системе уравнений для величин $n_i(t)$, $m_i(t)$, $c_i(t)$, $g_i(t)$, аналогичной (4.5). Детализации требует выбор значений $\overline{\alpha[g_i(t)]}$ в аргументах ядра K при $g = g_i(t)$. Оказывается, что $\overline{\alpha[g_i(t)]} = m_i(t)/n_i(t)$.

Рассмотрим также случай многокомпонентной примеси. Массу основного вещества в частице (например массу воды) будем обозначать g_1 , а массы других веществ (примесей) — $g_2, \dots, g_N$. Рассмотрим сначала однофазные частицы (например, жидкие капли), необходимые обобщения на случай частиц, находящихся и в твердом и в жидком состояниях, производятся аналогично разд. 5.2. Будем считать дисперсную систему пространственно однородной (по крайней мере в пределах счетного объема) и обозначим концентрацию композитных частиц, имеющих массы $g_1, g_2, \dots, g_N$ в момент времени t , через $C(g_1, g_2, \dots, g_N, t)$.

Для удобства и сокращения выкладок используем векторную запись массива $\{g_j\} : \mathbf{g} = \{g_1, \dots, g_N\}$ и, соответственно, введем обозначение $C(\mathbf{g}, t)$. За счет коагуляции происходит изменение концентраций, описываемое уравнением:

$$\begin{aligned} \partial_t C(\mathbf{g}, t) &= S(C; \mathbf{g}, t); \\ S(C; \mathbf{g}, t) &= \frac{1}{2} \int_0^{\mathbf{g}} K(\mathbf{g} - \mathbf{s}, \mathbf{s}) C(\mathbf{g} - \mathbf{s}) C(\mathbf{s}) d\mathbf{s} - C(\mathbf{g}) \int_0^{\infty} K(\mathbf{g}, \mathbf{s}) C(\mathbf{s}) d\mathbf{s}. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Уравнение (5.29) является очевидным обобщением уравнения Смолюховского (5.1), (5.2).

Для упрощения задачи эффективным является прием, изложенный в разд. 5.1, когда выделяется основная компонента (например, g_1), для которой требуется детальное описание спектра, а для остальных (примесных компонент $g_2, \dots, g_N$) достаточно описание на уровне среднего значения массы примеси в частице. В соответствии с этим, представим спектр $C(\mathbf{g}, t)$ в виде:

$$C(\mathbf{g}, t) = n(g_1, t) \prod_{j=2}^N \delta[g_j - \bar{g}_j(g_1)], \quad (5.30)$$

где среднее содержание примеси $\bar{g}_j(g_1)$ определим следующим образом:

$$\bar{g}_j(g_1) = \int_0^\infty \dots \int_0^\infty g_j C(\mathbf{g}, t) dg_2 \dots dg_N / \int_0^\infty \dots \int_0^\infty C(\mathbf{g}, t) dg_2 \dots dg_N. \quad (5.31)$$

Математический смысл представления (5.30) заключается в следующем: содержание основной компоненты g_1 в частицах описывается детально с помощью функции $n(g_1, t)$; остальные компоненты рассматриваем более грубо — на уровне среднего размера $\bar{g}_j(g_1)$, зависящего от массы основной компоненты g_1 в частице. После подстановки (5.30) в (5.29) и интегрирования по $g_2, \dots, g_N$, получим следующие уравнения для функции $n(g_1, t)$:

$$\partial_t n(g_1, t) = \frac{1}{2} \int_0^{g_1} K(g_1 - s, s) n(g_1 - s) n(s) ds - n(g_1) \int_0^\infty K(g_1, s) n(s) ds, \quad (5.32)$$

где использовано физически оправданное приближение $K(\mathbf{g}; \mathbf{s}) \approx K(g_1, \bar{g}_2, \dots, \bar{g}_N; s_1, \bar{s}_2, \dots, \bar{s}_N)$. Одномерное уравнение (5.32) можно решать либо ГА-методом, либо одним из сеточных методов (см. разделы 4.2, 4.3).

Наибольшие перспективы представляет собой применение ГА-метода, в котором решение представляется в виде набора δ -функций с «плавающими» значениями масс частиц $g_{1k}(t)$ (здесь I — число узлов):

$$n(g_1, t) = \sum_{k=1}^I n_k(t) \delta[g_1 - g_{1k}(t)]; \quad (5.33)$$

$$C(\mathbf{g}, t) = \sum_{k=1}^I n_k(t) \delta[g_1 - g_{1k}(t)] \prod_{j=2}^N \delta[g_j - \bar{g}_j(g_{1k})].$$

Видно, что в результате сочетания аппроксимации (5.30) с подходом, используемым в ГА-методе, для определения спектра $C(\mathbf{g}, t)$

необходимо знать только значения $n_k(t)$ в дискретных узловых точках, а также движущиеся координаты этих точек $g_{1k}(t)$ ($k = 1, \dots, I$). Уравнения для этих величин являются дискретными аналогами уравнений Смолуховского. Средние массы примесей $\bar{g}_j[g_{1k}(t)]$ ($j = 2, \dots, N$) определяются из своей системы уравнений для каждой узловой точки $g_{1k}(t)$. Фактически данный подход является объединением и обобщением результатов гл. 4 и разд. 5.1. Поскольку представление (5.33) заменяет интегралы суммами в узловых точках, то такой подход позволяет избежать приближенных квадратурных формул для интегралов в (5.29), (5.32), а результирующие уравнения для узловых точек g_{1k} , $\bar{g}_i$ и величин n_k находятся из (5.29), (5.32).

Для того, чтобы полностью определить решение (5.30) и сформулировать замкнутую систему уравнений кинетики коагуляции многокомпонентных частиц, необходимо дополнить уравнение (5.32) рецептом для нахождения узловых точек $\bar{g}_i(g_1)$. С учетом (5.30)

имеем $\int_0^\infty \dots \int_0^\infty C(\mathbf{g}, t) dg_2 \dots dg_N = n(g_1, t)$, поэтому для определения $\bar{g}_j(g_1)$ ($j = 2, \dots, N$) достаточно найти величины $m_j(g_1, t) \equiv \int_0^\infty \dots \int_0^\infty g_j C(\mathbf{g}, t) dg_2 \dots dg_N$, которые по своему смыслу означают среднее значение массы примеси g_j в частицах с фиксированной массой основной компоненты g_1 . После определения $m_j(g_1, t)$ узловые точки находятся из равенства

$$\bar{g}_j(g_1) = \frac{m_j(g_1, t)}{n(g_1, t)}. \quad (5.34)$$

Уравнения для функций $m_j(g_1, t)$ ($j = 2, \dots, n$) получим, умножая (5.29) на g_j и интегрируя по $g_2, \dots, g_N$ с учетом представления (5.30). В результате функции $m_j(g_1, t)$ находятся из следующей системы:

$$\begin{aligned} \partial_t m_j(g_1, t) = & \int_0^{g_1} K(g_1 - s, s) n(g_1 - s) m_j(s) ds - \\ & - m_j(g_1) \int_0^\infty K(g_1, s) n(s) ds. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Уравнения (5.32), (5.35) с учетом равенства (5.34) полностью определяют поведение спектра многокомпонентных композитных частиц, представленного в форме (5.30). Они являются основой для дальнейшего применения дискретной аппроксимации (5.33) и формулировки замкнутой системы уравнений для узловых величин $n_k(t)$, $g_{1k}(t)$, $\bar{g}_j[g_{1k}(t)]$.

Глава 6

ЧИСЛЕННЫЕ МОДЕЛИ АЭРОЗОЛЬНОЙ КИНЕТИКИ

Но неумный разум разложил
И этот мир,
Построенный на ощупь
Вникающим и мерящим перстом.
Все относительно:
И бред и знание.
Срок жизни истин —
Двадцать-тридцать лет —
Предельный возраст водовозной клячи.
Мы ищем лишь удобства вычислений,
А в сущности, не знаем ничего.

М. Волошин. Путиами Каина. Космос

Моделирование кинетики конденсации и коагуляции представляет большой интерес для решения практических задач, поскольку именно эти процессы определяют динамику поведения спектров частиц и, тем самым, основные физические свойства дисперсной системы. В предыдущих главах описаны постановки задач, использующие разнообразные формулировки кинетических уравнений, позволяющие учитывать наиболее важные факторы, сопутствующие этим процессам. Описаны способы численного моделирования аэрозольной кинетики с помощью интегрального подхода, сформулированы уравнения кинетики для многокомпонентных систем, позволяющие получить наиболее полную информацию о составе композитных частиц.

В данной главе конкретизируются данные по скоростям процессов коагуляции и конденсации в атмосферных условиях. Продолжено описание численных подходов к моделированию аэрозольной кинетики, детализирована постановка задачи для кинетики фазового перехода в облачных системах. Фактически материалы данной главы позволяют перейти к расчетам конкретных атмосферных процессов, протекающих с участием аэрозолей.

6.1. Скорости коагуляции атмосферных аэрозолей

В дополнение к механизмам коагуляции, описанным в разд. 1.6 (броуновская и градиентная коагуляция), в атмосферных условиях важно учитывать и другие механизмы (гравитационная, турбулентная коагуляция), действующие в области размеров частиц 10–100 мкм. Кроме того, необходимо корректно рассчитывать ядра коагуляции при совместном действии всех перечисленных выше механизмов, а также учитывать отличие сечений столкновений от геометрических сечений, возникающее за счет эффектов обтекания. Ниже приведены соответствующие зависимости, используемые нами при моделировании динамики формирования аэрозолей в атмосфере (Пискунов, 2000; Пискунов, 2004).

Коэффициент гравитационной коагуляции. Для описания этого процесса без учета коэффициента захвата используется выражение

$$K_g(r_1, r_2) = \pi(r_1 + r_2)^2 |u_{g1} - u_{g2}|; \quad u_{gi} = \left(1 - \frac{\rho_m}{\rho_p}\right) \tau_{pi} G, \quad (6.1)$$

где u_{gi} — установившаяся скорость седиментации; ρ_m и ρ_p — плотности среды и частицы соответственно; G — ускорение свободного падения. Коэффициент гравитационной коагуляции равен нулю для частиц одинакового размера, поскольку они движутся с одной и той же скоростью и не догоняют друг друга. Для частиц, движущихся в стоковом режиме, время релаксации τ_{pi} определяется по формуле

$$\tau_{pi} = \frac{2\rho_p r_i^2 C_c}{9\eta}. \quad (6.2)$$

Если коэффициент лобового сопротивления представить (см. разд. 1.1) в виде $C_w(\text{Re}) = 24/\text{Re} + C^0$ (где $C^0 = 0,42$), то получим следующую общую формулу для скорости седиментации:

$$u_{gi} = \frac{6\eta}{C^0 C_c \rho_m r_i} \left(\sqrt{1 + \frac{2C^0 C_c^2 \rho_m \rho_{pi}}{27\eta^2} r_i^3 \left(1 - \frac{\rho_m}{\rho_{pi}}\right) G} - 1 \right). \quad (6.3)$$

В табл. 6.1 приведены коэффициенты гравитационной коагуляции K_g для капель воды размером $r_1 = r$, $r_2 = 2r$ в воздухе при нормальных условиях.

Таблица 6.1. Коэффициенты гравитационной коагуляции
капель воды в воздухе

r , мкм	0,1	1	10	50	100	1000
K_g , см ³ /с	$1,018 \cdot 10^{-12}$	$1,018 \cdot 10^{-8}$	$1,015 \cdot 10^{-4}$	$4,839 \cdot 10^{-2}$	$3,737 \cdot 10^{-1}$	$8,615 \cdot 10^1$

Из сравнения результатов таблиц 1.7 и 6.1 следует, что при $r \geq 1$ мкм броуновская коагуляция пренебрежимо мала по сравнению с гравитационной.

Коэффициент коагуляции в турбулентном потоке. Для коэффициента коагуляции в турбулентном потоке в общем случае используется формула (Пискунов и др., 1996; Пискунов, 2000), являющаяся интерполяцией между предельными случаями полного увлечения частиц средой и их инерционным движением. Естественным параметром в интерполяционной формуле является отношение характерного времени мелкомасштабных турбулентных пульсаций ко времени релаксации скорости частиц

$$\gamma_i = \beta_{pi}(\nu/\varepsilon)^{1/2}, \quad (6.4)$$

где $\nu = \eta/\rho_m$ — кинематическая вязкость среды; ε — энергия на единицу массы, диссипируемая в среде в единицу времени, а $\beta_{pi} = 1/\tau_{pi}$ (τ_{pi} — введенное ранее время релаксации).

Коэффициент коагуляции определяется по формуле

$$K_T(r_1, r_2) = \pi(r_1 + r_2)^2 \sqrt{\frac{8}{3\pi} \langle w^2 \rangle}. \quad (6.5)$$

Среднее значение квадрата относительной скорости $\langle w^2 \rangle$ взаимодействующих частиц в турбулентном потоке представляется в довольно громоздком виде, приведенном в (Пискунов и др., 1996; Пискунов, 2000).

Коэффициент коагуляции при совместном действии броуновского движения, турбулентности и осаждения в поле тяжести. При совместном действии на частицы броуновского движения и турбулентности коэффициент коагуляции получен в работах (Пискунов и др., 1996; Пискунов, 2000) и выражается следующей достаточно простой формулой:

$$K_{TB}(r_1, r_2) = \sqrt{K_B^2(r_1, r_2) + K_T^2(r_1, r_2)}, \quad (6.6)$$

где K_B и K_T выражаются по формулам (1.39) и (6.5) соответственно. Для совместного действия всех трех механизмов коэффициент коагуляции имеет вид, приведенный в (Пискунов и др., 1996; Пискунов, 2000).

В табл. 6.2 даны коэффициенты коагуляции K_T , K_{TB} и K_{TBG} для капель воды с размерами $r_1 = r$, $r_2 = 2r$ в воздухе при нормальных условиях ($T = 293,15$ K). Скорость диссипации турбулентной энергии в атмосфере принята равной $\varepsilon = 500$ см²/с³ (Saffman and Turner, 1956).

Видно, что броуновская коагуляция важна для частиц размером $r \leq 0,1$ мкм. Гравитационная коагуляция дает вклад, сравнимый с турбулентной коагуляцией, и оба этих механизма важны для сравнительно крупных частиц с $r > 1$ мкм.

Таблица 6.2. Коэффициенты коагуляции капель воды в воздухе с учетом турбулентности

r , мкм	K_T , см ³ /с	K_{TB} , см ³ /с	K_{TBG} , см ³ /с
0,1	$2,648 \cdot 10^{-12}$	$1,108 \cdot 10^{-9}$	$1,108 \cdot 10^{-9}$
1	$4,162 \cdot 10^{-9}$	$4,222 \cdot 10^{-9}$	$1,087 \cdot 10^{-8}$
10	$3,316 \cdot 10^{-5}$	$3,316 \cdot 10^{-5}$	$1,058 \cdot 10^{-4}$
50	$1,136 \cdot 10^{-2}$	$1,136 \cdot 10^{-2}$	$4,944 \cdot 10^{-2}$
100	$9,813 \cdot 10^{-2}$	$9,813 \cdot 10^{-2}$	$3,838 \cdot 10^{-1}$
1000	$1,008 \cdot 10^{-2}$	$1,008 \cdot 10^2$	$1,295 \cdot 10^2$

Коэффициент захвата и учет дробления. В расчетах скорости коагуляции следует также учитывать, что коэффициент захвата $\theta(r_1, r_2)$ при гравитационной коагуляции капель может сильно отличаться от единицы (Mason, 1957), а достаточно крупные капли должны распадаться (Хргиан, 1978). В расчетных формулах распад капель учитывается введением общего множителя $f_b(r_1, r_2)$ перед коэффициентом коагуляции. В результате анализа экспериментальных и расчетных данных получены следующие интерполяционные формулы для множителя f_b и коэффициента захвата водяных капель (Пискунов, 2000):

$$\theta(r_1, r_2) = \exp \left[0,288 - \left(\frac{r_*}{R} \right)^2 - \frac{r_{**}}{r} \right]; \quad f_b(r_1, r_2) = \exp \left[- \frac{r_1^3 + r_2^3}{r_0^3} \right], \quad (6.7)$$

где $R = \max(r_1, r_2)$; $r = \min(r_1, r_2)$; $r_* = 21,46$ мкм; $r_{**} = 17,27$ мкм, $r_0 = 0,3$ см.

Обсуждение результатов. Из приведенных выше данных видно, что значения K испытывают сильный разброс — от 10^{-10} до 10^2 см³/с и тем самым мало показательны. Для оценки реальных скоростей коагуляции более удобной является величина $\chi = 1/KN_0$, имеющая размерность времени (N_0 — число аэрозольных частиц в единице объема). Если выделить типичный размер частиц r и зафиксировать полную массу M аэрозолей в единице объема, то для характерного времени коагуляции получим формулу

$$\chi(r) = \frac{4\pi\rho_p r^3}{3KM}. \quad (6.8)$$

Для водяных облаков обычно $M = 10^{-5}$ – 10^{-7} г/см³ (Mason, 1957). В соответствии с этим в табл.6.3 приведены значения $\chi(r)$ при $K = K(r, 2r)$, водности $M = 5 \cdot 10^{-7}$ г/см³ для различных механизмов коагуляции. При этом в дополнение к результатам табл.6.2 учтено влияние коэффициента захвата.

Видно, что за счет броуновского движения капель очень быстро коагулирует мелкодисперсная фракция с $r < 0,1$ мкм. Затем происходит

Таблица 6.3. Время коагуляции капель
в облаке с водностью $M = 5 \cdot 10^{-7}$ г/см³

r , мкм	χ_T , с	$\chi_{ТВ}$, с	$\chi_{ТВГ}$, с
0,1	$3,16 \cdot 10^3$	$7,56 \cdot 10^0$	$7,56 \cdot 10^0$
1	$2,01 \cdot 10^3$	$1,98 \cdot 10^3$	$1,98 \cdot 10^3$
10	$2,53 \cdot 10^2$	$2,53 \cdot 10^2$	$2,47 \cdot 10^2$
50	$9,22 \cdot 10^1$	$9,22 \cdot 10^1$	$2,34 \cdot 10^1$
100	$8,54 \cdot 10^1$	$8,54 \cdot 10^1$	$1,98 \cdot 10^1$
1000	$1,16 \cdot 10^2$	$1,16 \cdot 10^2$	$7,92 \cdot 10^1$

более медленный рост частиц в области размеров $r = 1\text{--}10$ мкм за счет действия всех механизмов коагуляции. И наконец, после формирования достаточно крупных частиц происходит их быстрая коагуляция за счет турбулентности и гравитационного осаждения, что приводит к интенсивному выпадению осадков из облака.

6.2. Скорости конденсации многокомпонентных частиц

В атмосферных задачах конденсация на остовных ядрах (из посторонних или сформировавшихся ранее частиц) играет основную роль, причем имеет место процесс активации остовных частиц, служащих ядрами конденсации. Этот процесс заключается в том, что со временем только часть ядер начинает поглощать пары определенного вещества (активируется), поскольку на поверхности ядер требуется появление «островков» конденсата из инородного для ядер вещества и только после этого может начаться развитая конденсация паров этого вещества. Фактически в модели должен вводиться источник жизнеспособных (активированных) ядер, интенсивность которого пропорционально общему количеству ядер; эта интенсивность зависит от спектра, химсостава и растворимости этих ядер, а также внешних условий (температуры, давления паров конденсирующегося вещества и т. д.). Следует также иметь в виду, что многие атмосферные задачи требуют корректного описания остовных частиц в течение длительного промежутка времени, когда, например, водные капли высыхают в процессе переноса, затем снова обводняются и т. д. В связи с этим, во многих задачах требуются выражения для скоростей конденсации, которые описывают все возможные типы примесей (растворимые, диссоциирующие и нерастворимые остовы, а также конденсирующиеся примеси).

Введем следующие обозначения: m_{0vj} — масса молекулы пара j -го вещества; r — радиус композитной капли; g_j — масса j -го вещества в составе капли; ρ_j — его плотность; A_j — молярная масса; k — постоянная Больцмана; p_{vj} — парциальное давление паров j -го вещества; T — температура среды; $p_{sj}(r, T)$ — давление насыщенных паров j -го

вещества над частицей радиуса r ; $P_{sj}(T)$ — давление насыщенных паров j -го вещества над плоской поверхностью; σ — поверхностное натяжение; $v_{vTj} = \sqrt{8kT/\pi m_{ovj}}$, α — коэффициент аккомодации (доля молекул пара, прилипающих при столкновении к поверхности капли). Радиус композитной капли определим по формуле:

$$r = \left[\frac{3}{4\pi} \sum_{j=1}^N \frac{g_j}{\rho_j} \right]^{1/3}.$$

Эта формула является приближенной, поскольку из-за эффектов «упаковки» разнородных молекул объем раствора лишь примерно равен сумме объемов компонентов.

В ряде задач испарение (конденсация) пара происходит в условиях ее обтекания газовой средой со скоростью u (например, при падении в поле тяжести). В этом случае вводится так называемый «фактор вентиляции» F_v , определяемый по формуле (Proracher and Klett, 1997):

$$F_v = \begin{cases} 1 + 0,108 \operatorname{Re}, & \operatorname{Re} < 2,5, \\ 0,78 + 0,308 \operatorname{Re}^{1/2}, & \operatorname{Re} \geq 2,5, \end{cases} \quad (6.9)$$

где $\operatorname{Re}(u)$ — число Рейнольдса для данной скорости u и размера частицы r . В итоге $F_v = F_v(r)$.

Общее уравнение, описывающее процесс конденсации (испарения) паров j -го вещества для композитной капли радиуса r , определяется балансом между подачей пара на поверхность капли и испарением с поверхности. Оно имеет следующий вид:

$$dt g_j \equiv v_j(\mathbf{g}, t) = f_j(r, T) [p_{vj} - p_{sj}(r, T)]|_{T=T_r}, \quad (6.10)$$

где

$$f_j(r, T) = \alpha F_v \pi r^2 m_{ovj} v_{vTj} / (1 + 3r\alpha/4\lambda_{vj}) kT. \quad (6.11)$$

В формулах (6.10) и (6.11) T_r — температура поверхности капли. Поскольку конденсация или испарение происходят с выделением или поглощением тепла, то температуры капли и среды могут значительно отличаться. Значение T_r находим из условий теплового баланса, приравнявая тепловыделение в единицу времени потоку тепла в окружающий воздух:

$$\sum_{j=1}^N L_j v_j = 4\pi r \chi (T_r - T), \quad (6.12)$$

где L_j — удельная теплота конденсации паров j -го вещества; χ — теплопроводность воздуха.

Учет различия между температурами капель T_r и среды T и вычисление поправок к скорости конденсации однокомпонентных частиц за счет этого эффекта проведены в разд. 1.5. Воспользовавшись анало-

гичным приемом, получим следующее выражение для скорости роста (испарения) j -й компоненты в капле:

$$v_j = (v_j)_0 - \frac{f_j d_T p_{sj}(r, T) \sum_{k=1}^N L_k(v_k)_0}{4\pi r \chi + \sum_{k=1}^N f_k d_T p_{sk}(r, T)}, \quad (6.13)$$

где

$$(v_j)_0 = f_j(r, T) [p_{vj} - p_{sj}(r, T)]. \quad (6.14)$$

Выражение (6.14) для величины $(v_j)_0$ представляет собой скорость конденсационного роста (испарения) j -й компоненты в капле без учета того, что температура частицы отличается от температуры среды, а выражение (6.13) представляет собой скорость конденсационного роста (испарения) j -й компоненты в капле, учитывающую разнотемпературность. Чтобы дать окончательный рецепт вычисления скорости (6.13), необходимо определить $d_T p_{sj}(r, T)$. Для давления насыщенного пара j -го вещества над плоской поверхностью обычно используется интерполяционная формула (1.25):

$$P_{sj}(T) = \exp \left(-\frac{A_{sj}}{T} + B_{sj} + C_{sj} \ln T + D_{sj} T \right), \quad (6.15)$$

где A_{sj} , B_{sj} , C_{sj} , D_{sj} — некоторые константы, зависящие от конкретного вида и фазового состояния j -го вещества. С учетом этой интерполяции

$$\begin{aligned} d_T P_{sj}(T) &= \left(\frac{A_{sj}}{T^2} + \frac{C_{sj}}{T} + D_{sj} \right) P_{sj}(T); \\ d_T p_{sj}(r, T) &= \left(\frac{A_{sj}}{T^2} + \frac{C_{sj}}{T} + D_{sj} \right) p_{sj}(r, T). \end{aligned}$$

При этом взята конкретная связь между $P_{sj}(T)$ и $p_{sj}(r, T)$ (см. далее формулу (6.18)) и использовано неравенство $2\sigma A_j / r R \rho \ll A_{sj}$. Температурная зависимость давления насыщенного пара определяется уравнением Клайперона–Клаузиуса:

$$d_T P_{sj}(T) = \frac{L_j m_{0vj} P_{sj}(T)}{kT^2}. \quad (6.16)$$

Подставляя (6.15) в (6.16), получим $\frac{L_j m_{0vj}}{kT^2} = \left(\frac{A_{sj}}{T^2} + \frac{C_{sj}}{T} + D_{sj} \right)$, т. е.:

$$d_T p_{sj}(r, T) = \frac{L_j m_{0vj}}{kT^2 p_{sj}(r, T)}. \quad (6.17)$$

В качестве обобщения известных формул для давления насыщенного пара, полученных применительно к однокомпонентным системам и слабым растворам, мы предлагаем следующую аппроксимацию для определения давления насыщенного пара над поверхностью многокомпонентной капли радиуса r :

$$p_{sj}(r, T) = \nu_j P_{sj}(T) \exp\left(\frac{2\sigma A_j}{\rho R T r}\right), \quad (6.18)$$

где $\nu_j = \left(\frac{d_j g_j}{A_j}\right) / \left(\sum_{k=1}^N d_k g_k / A_k\right)$, d_j — коэффициент Вант-Гоффа j -го вещества, зависящий как от химических свойств (растворимость, диссоциация в растворе и т. д.), так и от концентрации вещества. Коэффициенты Вант-Гоффа для различных веществ определены экспериментально и изменяются, например, для раствора NaCl от 2,0 до 6,131 (Мейсон, 1961), если менять концентрацию от бесконечного разбавления до насыщения.

Для проверки работоспособности аппроксимационной формулы (6.18) рассмотрим два предельных случая:

- когда данное вещество отсутствует в капле (т. е. $\nu_j = 0$);
- когда вещество является растворителем в слабом растворе (т. е. $\nu_j \approx 1$).

Поток молекул j -го вещества, определяемый процессами вылета молекул с поверхности капли, задает скорость испарения вещества (см. второй член в (6.10), пропорциональный p_{sj}). Если вещество отсутствует в капле ($\nu_j = 0$), то оно и не должно испаряться. Поэтому должно выполняться равенство $p_{sj} = 0$, что на самом деле и получается из (6.18). Для проверки другого предельного случая воспользуемся следующей формулой, определяющей давление насыщенного пара растворителя над каплей раствора (Мейсон, 1961):

$$\ln\left(\frac{p_{sj}}{P_{sj}}\right) = \frac{2\sigma A_i}{\rho R T r} - \frac{\rho_i}{\rho} \ln\left(1 + \sum_{k \neq j} \bar{\nu}_k\right), \quad (6.19)$$

где $\bar{\nu}_k = dn_k/n_j$, n_k — количество молей k -го вещества, растворенного в n_j молях растворителя, а коэффициент Вант-Гоффа для растворителя в (6.19) взят равным единице ($d_j = 1$). Учитывая, что $\sum_k \bar{\nu}_k = 1$,

$\sum_{k \neq j} \bar{\nu}_k \approx \sum_{k \neq j} \nu_k$, $\nu_j \approx 1$, $\rho_j \approx \rho$, формулу (6.19) несложно преобразовать в (6.18).

Таким образом, интерполяционная зависимость (6.18) правильно описывает предельные случаи. Если записать (6.18) для однотипных веществ и просуммировать по всем компонентам, то получим изве-

стную формулу Томсона для давления насыщенного пара над поверхностью капли в однокомпонентной системе: $p_s(r, T) = P_s(T) \exp\left(\frac{2\sigma q}{rkT}\right)$.

В дальнейшем мы будем использовать формулу (6.18) в расчетах давления над каплей насыщенных паров для любого j -го вещества, а также для нахождения по (6.13) скорости конденсации (испарения) паров j -го вещества. Очевидным достоинством выражения (6.18) является его применимость для любого типа вещества, независимо от того, является ли это вещество растворителем, нерастворимой или растворимой примесью, диссоциирующим реагентом — важно лишь знать соответствующие коэффициенты Вант-Гоффа вещества. Так, если оно является растворителем, то его коэффициент Вант-Гоффа берется равным единице, для нерастворимых веществ (например, минерального остова) этот коэффициент полагается равным нулю, для диссоциирующего реагента нужно знать среднее число компонент d_j , на которые он распадается.

6.3. Моделирование кинетики формирования аэрозолей с помощью программы AERFORM

Кинетические уравнения конденсации и коагуляции достаточно сильно отличаются друг от друга по своей математической природе: кинетическое уравнение конденсации представляет собой квазилинейное уравнение первого порядка (аналог уравнений переноса излучения), а кинетическое уравнение коагуляции — билинейное интегро-дифференциальное уравнение (аналог уравнения Больцмана). Соответственно этому и достаточно сильно отличаются численные способы решения данных уравнений.

Моделирование кинетики конденсации. Метод математического моделирования процессов зарождения и конденсационного роста частиц в пересыщенном паре развит в работе (Голубев и др., 1991). Численное решение кинетического уравнения конденсации

$$\partial_t C(g, t) + \partial_g [v(g, t) C(g, t)] = J(t) \delta[g - \tilde{g}(t)] \quad (6.20)$$

осуществляется на основе метода частиц. Для этого на каждом временном интервале $[t^n, t^{n+1} = t^n + \Delta t]$ спектр $C(g, t)$ представляется в виде

$$C(g, t) = \sum_{i=1}^M N_i(t) \delta[g - g_i(t)] + N_{M+1}(t) \delta[g - g_{M+1}(t)], \quad (6.21)$$

причем $N_{M+1}(t = t^n) = 0$. Исходя из этого представления $C(g, t)$ и используя уравнение (6.20), можно получить следующую систему уравнений для величин N_i, g_i :

$$d_t N_i = 0, \quad 1 \leq i \leq M; \quad (6.22)$$

$$d_t g_i = v_g(g_i), \quad 1 \leq i \leq M+1; \quad (6.23)$$

$$N_{M+1}(t^{n+1}) = \int_{t^n}^{t^{n+1}} J dt. \quad (6.24)$$

Уравнение (6.23) означает, что точки $g_i(t)$ движутся по характеристикам. При этом, величины N_i (веса модельных частиц), имевшиеся в системе к моменту $t = t^n$, на шаге Δt не изменяются. Исключение составляет случай, когда частица приходит на границу $g = 0$. При $g_i \leq 0$ частицу можно считать испарившейся и положить $N_i = 0$. Вес N_{M+1} модельной частицы, инжектируемой в систему на этом шаге, согласно (6.24) должен быть выбран таким образом, чтобы правильно передать число реальных частиц, рождаемых источником в интервале времени $[t^n, t^{n+1}]$. Начальная масса инжектируемой модельной частицы также определяется источником: $g_{M+1}(t = t^n) = \tilde{g}_{M+1}(t = t^n)$.

Необходимо отметить, что для практических задач физики атмосферы и проблем безопасности важным фактором, ускоряющим процесс конденсационного роста аэрозолей, является наличие в воздухе атмосферных ядер конденсации и других инородных частиц (ранее сконденсировавшихся веществ, пыли, грунта и т.д.). Поскольку при численном моделировании кинетики конденсации в работах (Голубев и др., 1991; Aloyan et al., 1992) используется метод частиц, то учет инородных веществ (частиц остова) при конденсации производится без особых трудностей.

Моделирование кинетики коагуляции. Обратимся сначала к математическому моделированию кинетики коагуляции однокомпонентных частиц, описываемой обычным уравнением Смолуховского (3.1). Метод численного решения, реализованный в программе, заключается в следующем (Piskunov et al., 1995a, Пискунов, 2000). Введем по переменной g сетку узлов $g_1 = 0, g_2, \dots, g_J$ и определим число частиц N_i в интервалах (g_i, g_{i+1}) :

$$N_i = \int_{g_i}^{g_{i+1}} C(g, t) dg \quad (i = 1, 2, \dots, J-1).$$

При выводе уравнений для величин N_i воспользуемся не самим исходным уравнением (3.1), а результатом его умножения на g и последующего интегрирования по интервалу (g_i, g_{i+1}) . Данный прием позволит получить систему уравнений, которая автоматически обеспечивает правильный баланс массовой концентрации M (для свободных систем это закон сохранения M) при разностной аппроксимации решений. Используя при вычислении интегралов квадратурные формулы, в которых для каждого интервала (g_i, g_{i+1}) функция $C(g)$ заменяется на среднюю величину $\bar{C}_k = N_k / (g_{k+1} - g_k)$, можно для величин N_i

получить систему обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{j=1}^i \sum_{k \leq i} a_{jk}^i N_j N_k - N_i \sum_{j=1}^{J-1} N_j b_{ij}, \quad (6.25)$$

где коэффициенты a_{jk}^i , b_{ij} выражаются через интегралы от ядра коагуляции. Для численного решения уравнения (6.25) в программе применяется неявная схема первого порядка точности, т. е. схема вида

$$\frac{N_i^{n+1} - N_i^n}{\Delta t} = F_i(N_1^{n+1}, \dots, N_{J-1}^{n+1}). \quad (6.26)$$

Для решения нелинейной системы алгебраических уравнений (6.26) используется итерационный метод Зейделя. Характерным свойством решений уравнения Смолуховского является смещение спектра с ростом времени t в область больших значений g . Поэтому в программе предусмотрена процедура расширения сетки по переменной g с последующей интерполяцией величин N_i на новую сетку. При этом в основу алгоритма интерполяции положено требование сохранения суммарной массы частиц в системе.

Этот метод прошел тестирование на модельных задачах двух типов: задачах, имеющих аналитическое решение, и задачах, для которых известны автомодельные решения уравнения Смолуховского. Для задач с постоянным ядром коагуляции численный метод обеспечивал достаточную для приложений точность уже при небольшом ($J \approx 20-30$) числе узлов сетки по g . Для броуновской коагуляции в диффузионном режиме результаты расчетов показывают, что автомодельное и численное решения для $t = 10$ хорошо согласуются друг с другом. В целом метод расщепления не вносит значимой погрешности в результаты расчетов. Применение результатов расчетов к интерпретации экспериментальных результатов дает качественно правильную картину формирования аэрозолей в облаке взрыва (см. далее гл. 9).

Коагуляция композитных частиц. Для моделирования кинетики коагуляции композитных частиц приходится решать более сложную, чем (3.1), систему уравнений (5.6)–(5.8). Выделим в отдельную фракцию $c(g)$ частицы, содержащие только примесь (например, радиоактивное вещество или кислоту), и будем называть пассивной фракцией частицы балластного вещества (например, материалы теплоносителя, грунт, водяные капли и т. д.), а композитной фракцией — частицы со смешанным составом. Величины, характеризующие только композитную фракцию, в дальнейшем будут снабжаться значком «с»: $n_c(g) \equiv n(g) - c(g)$; $m_c(g) = m(g) - gc(g)$. Для численного решения уравнений (5.6)–(5.8) зададим сетки

$$\omega_c = \{\tilde{g}_1 = 0, \tilde{g}_2, \dots, \tilde{g}_L\}, \quad \omega = \{g_1 = 0, g_2, \dots, g_J\}$$

для композитной фракции и примеси соответственно. Обозначим через ν_j число частиц примеси в интервале (g_j, g_{j+1}) , через N_{ci} — число композитных частиц в интервале $(\tilde{g}_i, \tilde{g}_{i+1})$, через I_{ci} — массу частиц примеси, содержащуюся в композитных частицах с массой в интервале $(\tilde{g}_i, \tilde{g}_{i+1})$:

$$\nu_j = \int_{g_j}^{g_{j+1}} c \, dg, \quad N_{ci} = \int_{\tilde{g}_i}^{\tilde{g}_{i+1}} n_c \, dg, \quad I_{ci} = \int_{\tilde{g}_i}^{\tilde{g}_{i+1}} m_c \, dg. \quad (6.27)$$

Эти величины являются основными сеточными функциями. При выводе уравнений для них предположим, что функции $c(g)$, $n_c(g)$, $m_c(g)$ кусочно-постоянны в интервалах сеток ω , ω_c . Ядро коагуляции также предполагается кусочно-постоянной функцией двух переменных. При принятых предположениях можно получить систему обыкновенных дифференциальных уравнений для величин ν_j , N_{ci} , I_{ci} , которая подробно описана в работе (Piskunov et al., 1997a). Там же содержатся все детали численного решения этой системы.

Совместное моделирование кинетики коагуляции/конденсации.

Для получения расчетных данных об изменении состава композитных частиц в результате коагуляции и конденсации целесообразно использовать метод расщепления по физическим процессам (Марчук, 1988), чтобы по отдельности пользоваться соответствующими кинетическими уравнениями для каждого из этих процессов. В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением двухкомпонентных смесей, для описания которых введем функцию $C(g, \alpha, t)$ — концентрацию частиц, содержащих на момент времени t суммарную массу g и массу примеси α . Масса балластного вещества (пассивной фракции) в частице при этом равна $g - \alpha$.

Будем предполагать, что конденсируется (испаряется) только одно вещество (оно может принадлежать, как к примеси, так и к пассивной фракции), а неконденсирующееся вещество будем называть остовом. Разделение на примесь и пассивную фракцию достаточно условно и зависит от специфики задачи. Например, для процессов формирования кислотных осадков пассивной фракцией и остовом удобно считать капли воды, а примесью — конденсирующееся вещество, состоящее из паров и капель кислоты. В начальной стадии процесса формирования водяных капель на атмосферных ядрах конденсации в качестве пассивной фракции и остова можно взять почвенные или солевые аэрозоли, а примесью — конденсирующуюся воду и водяной пар. На более поздних стадиях, когда конденсирующееся вещество составляет основную массу частиц, его удобно считать пассивной фракцией, а ядра конденсации считать примесью и остовом (отметим, что определение остова и конденсирующегося вещества на всех стадиях остается одним и тем же).

Практически наиболее интересен случай, когда остов совпадает с пассивной фракцией, а конденсирующееся вещество с примесью. При расчетах кинетики коагуляции мы явно выделим, так же как и в разд. 5.1, вклады примеси и композитных частиц в суммарную концентрацию:

$$C(g, \alpha, t) = c(g, t) \delta(g - \alpha) + c_c(g, \alpha, t), \quad (6.28)$$

где α — масса конденсирующегося вещества (примеси) в частице; $c(g, t)$ — концентрация частиц примеси; $c_c(g, \alpha, t)$ — концентрация композитных частиц. Методы расчета основных спектральных величин c , n_c , m_c полностью совпадают с описанными в начале этого раздела. После окончания автономного расчета процесса коагуляции величины c , n_c могут непосредственно использоваться в качестве стартовых значений величин, описывающих процесс конденсации, а значения масс остова можно определить, исходя из среднего содержания примеси в каждой частице:

$$g_{po} = g - \bar{\alpha}; \quad \overline{\alpha(g, t)} = \frac{m_c(g, t)}{n_c(g, t)}. \quad (6.29)$$

При описании кинетики конденсации можно считать, что масса остова в частицах не меняется. Поэтому будем считать, что в процессе конденсации между величинами c_c , n_c и m_c выполняется следующая связь (здесь g_{po} — масса остова в частице на момент начала шага по конденсации):

$$c_c(g, \alpha, t) = n_c(g, t) \delta(g - g_{po} - \alpha); \quad m_c(g, t) = (g - g_{po}) n_c(g, t). \quad (6.30)$$

Кинетические уравнения конденсации для функций распределения c , n_c следующие (см. гл. 2):

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial g}(v_g c) = J(g, t) \delta[g - g_*(t)]; \quad \frac{\partial n_c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial g}(v_g n_c) = 0, \quad (6.31)$$

где v_g — скорость роста частицы с суммарной массой g ; J — скорость флуктуационного зародышеобразования частиц; g_* — масса капли критического размера. После окончания автономного расчета процесса конденсации величины c , n_c , m_c могут непосредственно использоваться в качестве стартовых значений величин, описывающих процесс коагуляции. Далее пользуемся процедурой решения уравнений (5.6)–(5.8), описанной выше.

Тем самым мы сформулировали основные уравнения, используемые при расчетах кинетики конденсации и коагуляции в методе расщепления по физическим процессам, и определили основные правила перехода между величинами, рассчитываемыми в автономных блоках.

Случай, когда остов совпадает с примесью, а конденсирующееся вещество — с пассивной фракцией, несколько более громоздок

и, строго говоря, его следует рассматривать, исходя из общей функции распределения $C(g, \alpha, t)$, детально прослеживая аналогию с рассчитываемыми в автономных блоках величинами. Однако в практических задачах, характерных для этого случая, обычно закончены процессы флуктуационного зародышеобразования и столкновений частиц примеси между собой. Тем самым отпадает необходимость во введении функций распределения частиц чистого конденсирующегося вещества или чистой примеси и для описания кинетических процессов достаточно вычисления только спектров композитных частиц $n_c(g, t)$, $m_c(g, t)$. Уравнения для их нахождения и правила перехода между величинами, рассчитываемыми в автономных блоках, сформулированы выше. Единственным уточнением является то, что под величиной α следует подразумевать массу остова и при переходе от расчетов коагуляции к расчетам конденсации необходимо использовать равенство $g_{po} = \bar{\alpha}$.

Характеристики программы AERFORM. Перечисленные выше подходы были использованы для создания численной программы AERFORM (Golubev et al., 1999; Пискунов, 2000), разработанной А. И. Голубевым и Н. А. Исмаиловой и описывающей совокупность основных кинетических процессов в дисперсных системах.

В моделях кинетики конденсации, используемых в программе AERFORM, учитываются следующие физические эффекты:

- зарождение частиц новой фазы с интенсивностью J за счет флуктуационного образования комплексов молекул в пересыщенном паре — гомогенная нуклеация;
- конденсационный рост и испарение частиц (капель) с использованием скорости $v(g, t)$, применимой в любом диапазоне размеров частиц;
- процессы конденсационного роста на инородных частицах (остове), например, на атмосферных ядрах конденсации — гетерогенная нуклеация;
- наличие среды-носителя, в которой находятся пары конденсирующегося вещества;
- процесс выделения скрытой теплоты конденсации с учетом перераспределения тепла между каплей, паром и средой-носителем;
- изменение удельного объема системы со временем $V(t)$, например, за счет адиабатического расширения.

В моделях кинетики коагуляции учитываются следующие практически важные процессы:

- формирование композитных частиц, состоящих из примеси и основной фракции;
- разнообразные механизмы коагуляции (броуновское и турбулентное блуждание, осаждение в поле тяжести и т. д.), играющие роль в атмосферных процессах;

- эффекты обтекания и неполного захвата частиц при столкновениях, процессы распада крупных капель при падении в атмосфере, гравитационное выпадение частиц из коагулирующего объема.

Совместное решение уравнений кинетики конденсации и коагуляции основано на схеме расщепления по физическим процессам (Марчук, 1988). При этом способы пересчета между модельными частицами и сеточными величинами обеспечивают баланс масс и концентраций частиц.

Численное решение уравнений кинетики конденсации осуществляется на основе метода частиц. Каждая модельная частица характеризуется концентрацией N_i , лагранжевой массой g_j , меняющейся вдоль характеристик $d_t g_i = v(g_i, t)$, и массой остова α_i в ее составе. Изменение N_i определяется интенсивностью источника J и процессом полного испарения частиц ($g_i = 0$).

При численном решении уравнений кинетики коагуляции задаются сетки ω_c , ω по переменной g (массе частиц) для композитной фракции и примеси соответственно. Основными сеточными величинами являются: число частиц ν_j примеси в интервалах сетки ω , число композитных частиц N_{ci} в интервалах сетки ω_c , масса примеси I_{ci} в композитных частицах, принадлежащих соответствующим интервалам сетки ω_c . Функции распределения и ядра коагуляции предполагаются кусочно-постоянными в интервалах сеток ω , ω_c . Для вычисления ν_j , N_{ci} , I_{ci} решается система обыкновенных дифференциальных уравнений, получаемая после интегрирования по g исходных кинетических уравнений и автоматически обеспечивающая баланс масс частиц.

Поскольку при описании процессов конденсации и коагуляции используются, вообще говоря, различные функции распределения и различные методы дискретизации, то при создании единой программы расчета основными проблемами являются:

- определение единого набора функций распределения, корректно описывающего композитные частицы и учитывающего специфику процессов конденсации и коагуляции;
- создание способов перехода от численных величин, рассчитываемых по одной из программ кинетики, к другой.

Способы решения этих проблем, применяемые в программе AERFORM, описаны в (Golubev et al., 1999; Пискунов, 2000).

6.4. Модель кинетики фазовых переходов в облачных системах

Кинетические уравнения, описывающие процессы коагуляции и конденсации в системах с двухкомпонентной дисперсной средой, получены в разд. 5.2. Они выглядят особенно компактно в случае, когда дисперсная среда представляет собой смесь жидких капель и ледяных частиц, а жидкие капли мгновенно промерзают при их столкновениях

с ледяными частицами. Эти уравнения могут служить основой для численного моделирования атмосферных микрофизических процессов, происходящих в смешанных облаках.

Для совместного моделирования кинетики конденсации/коагуляции использован метод расщепления по физическим процессам. На основе уравнений роста отдельных облачных частиц, а также уравнений массового и теплового баланса сформулирована модель кинетики конденсации в системах с двухкомпонентной дисперсной средой, учитывающая разницу в скоростях конденсации пара над водой и льдом. Для кинетики коагуляции использована модель, рассмотренная в разд. 5.2. Используются реальные скорости конденсационного и коагуляционного роста водяных капель и ледяных частиц из разд. 6.1, а в уравнениях учитываются процессы спонтанного промерзания капель (Shiino, 1978). Особое внимание обращено на описание динамики фазового перехода при температуре плавления (таяния). Подробное описание данной модели содержится в работах (Пискунов, Петров, Голубев, 2001; Piskunov, Petrov, Golubev, 2003).

Основные уравнения и описание численного подхода. Будем считать, что рассматриваемая нами двухкомпонентная дисперсная среда представляет собой смесь жидких облачных капель и ледяных частиц, причем жидкие капли мгновенно промерзают при их столкновениях с ледяными частицами. Кинетические уравнения, описывающие процессы формирования частиц в системах с двухкомпонентной дисперсной средой, имеют вид (5.15), (5.16) (ниже для удобства применяются другие обозначения):

$$\begin{aligned} \partial_t n_w(g, t) + \partial_g [v_w(g) n_w(g)] = & \frac{1}{2} \int_0^g K(g-s, s) n_w(g-s) n_w(s) ds - \\ & - n_w(g) \int_0^\infty K(g, s) \nu(s) ds + J_w(g, t), \end{aligned} \quad (6.32)$$

$$\begin{aligned} \partial_t n_i(g, t) + \partial_g [v_i(g) n_i(g)] = & \frac{1}{2} \int_0^g K(g-s, s) n_i(g-s) [n_i(s) + \\ & + 2n_w(s)] ds - n_i(g) \int_0^\infty K(g, s) \nu(s) ds + J_i(g, t), \end{aligned} \quad (6.33)$$

где $n_w(g)$ — концентрация (спектр) облачных капель (ОК); $n_i(g)$ — концентрация ледяных частиц (ЛЧ), а $n = n_w + n_i$ — суммарная концентрация. Источники J_w и J_i в уравнениях (6.32) и (6.33) описывают изменение спектров ОК и ЛЧ, например, в результате процессов нуклеации (Mason, 1957; Fletcher, 1962) или спонтанного промерзания ОК (Cotton, 1972; Shiino, 1978).

Численное решение уравнений (6.32), (6.33) производится на основе метода расщепления по физическим процессам. В соответствии с этим методом, на каждом временном интервале $[t^k, t^{k+1} = t^k + \Delta t]$ исходная система кинетических уравнений заменяется на две подсистемы

$$\partial_t n_w(g, t) = \frac{1}{2} \int_0^g K(g-s, s) n_w(g-s) n_w(s) ds - n_w(g) \int_0^\infty K(g, s) \nu(s) ds, \quad (6.32a)$$

$$\begin{aligned} \partial_t n_i(g, t) = \frac{1}{2} \int_0^g K(g-s, s) n_i(g-s) [n_i(s) + 2n_w(s)] ds - \\ - n_i(g) \int_0^\infty K(g, s) \nu(s) ds, \end{aligned} \quad (6.33a)$$

$$\partial_t n_w(g, t) + \partial_g [v_w(g) n_w(g)] = J_w(g, t), \quad (6.32б)$$

$$\partial_t n_i(g, t) + \partial_g [v_i(g) n_i(g)] = J_i(g, t), \quad (6.33б)$$

одна из которых (а) описывает процессы коагуляции, другая (б) — процессы конденсации с источниками. При этом результаты, полученные на момент времени $t = t^{k+1}$ для одной подсистемы, служат начальными данными при $t = t^k$ для другой.

Для расчета кинетики коагуляции (6.32a), (6.33a) использован метод из разд. 6.3 для композитных частиц. Физическая модель для скоростей коагуляции включает в себя все основные механизмы, которые описаны в разд. 6.1 и важны для атмосферных процессов — броуновское и турбулентное блуждание, осаждение в поле тяжести и т. д. Численное решение уравнений кинетики конденсации (6.32б), (6.33б) осуществлено на основе метода частиц (см. разд. 6.3).

Физическая модель для кинетики конденсации. Уравнения движения модельных частиц $v(g, t) = d_t g$ (или уравнения характеристик для системы (6.32б), (6.33б)) являются ключевыми для описания конденсации. Они совпадают с уравнениями материального роста частиц и имеют непосредственный физический смысл. Поэтому, задача определения скоростей $v(g, t)$ является базой для нахождения численных решений кинетического уравнения конденсации (6.32б), (6.33б). Скорости $v(g, t)$ должны зависеть от параметров частицы (размера, характеристик испаряющегося вещества и его фазового состояния), а также от параметров газовой среды (плотности, температуры, состава). Кроме того, скорости $v(g, t)$ неявно зависят и от самих концентраций частиц n_w , n_i (по крайней мере, они зависят от концентрации пара, которая, в свою очередь, связана с n_w , n_i уравнением массового баланса). Поэтому процесс, описываемый уравнениями (6.32б), (6.33б), фактически является нелинейным и уравнения роста отдельных частиц должны

быть дополнены общими уравнениями баланса, учитывающими эволюцию спектра всего ансамбля частиц. Перейдем к формулировке замкнутой системы уравнений, описывающих конденсационные процессы в системах с двухкомпонентной дисперсной средой, состоящей из смеси ОК и ЛЧ.

В соответствии с результатами раздела 6.2 скорость конденсации можно представить следующим образом (обозначения величин совпадают):

$$d_t g = \alpha \pi r^2 m_{ov} v_{vT} \frac{[p_v - p_s(r, T)]}{(1 + 3r\alpha/4\lambda_v) kT} \Big|_{T=T_r}, \quad (6.34)$$

Поскольку конденсация или испарение происходят с выделением или поглощением тепла, то температуры частицы T_r и среды T немного отличаются, причем обусловленное этим различие в скоростях $d_t g$ может быть довольно существенным. Значение T_r находят из условия, что выделение тепла при конденсации идет на прогрев воздуха, окружающего частицу. Учитывая температурные поправки, получим следующее уравнение для скорости роста:

$$d_t g = \frac{1}{1 + b} (d_t g)_0, \quad (6.35)$$

где

$$(d_t g)_0 = \alpha \pi r^2 m_{ov} v_{vT} \frac{[p_v - p_s(r, T)]}{(1 + 3r\alpha/4\lambda_v) kT}, \quad (6.36)$$

$$b = \frac{\alpha r m_{ov} v_{vT} [A_s T^{-2} + C_s T^{-1} + D_s] p_s(r, T) L}{(1 + 3r\alpha/4\lambda_v) 4\chi kT}. \quad (6.37)$$

При выводе (6.37) учтено, что $2\sigma q/rk \ll A_s$. Выражение (6.36) для величины $(d_t g)_0$ представляет собой скорость конденсации при равенстве температуры частицы и температуры среды, а параметр b из (6.37) определяет поправку за счет различия T_r и T .

Пусть x_i и x_w — степени конденсации ОК и ЛЧ (доли массы во фракциях по отношению к общей массе конденсирующегося вещества), $x = x_i + x_w$, b_i и b_w — соответствующие поправки (6.37) для льда и воды, $c_j = C_{vj} A_j / R$ (символ j принимает значения m , v , w , i , « m » — среда-носитель, « v » — пар) — безразмерные теплоемкости, A_j — молярные массы, C_{vj} — соответствующие удельные теплоемкости при постоянном объеме, L — удельная теплота конденсации, $U_i = L_i A_v$ и $U_w = L_w A_v$ — теплоты конденсации на моль льда и воды соответственно, $a = \rho_m A_v / \rho_0 A_m$, ρ_m — плотность среды-носителя, ρ_0 — суммарная массовая концентрация конденсирующегося вещества в облаке (влажность). Значения безразмерных теплоемкостей следующие: $c_m = 2,503$, $c_v = 3,2$, $c_w = 9,1$, $c_i = 4,18$. Теплоты конденсации на моль: $U_w = 45\,000$ Дж/моль и $U_i = 51\,000$ Дж/моль.

В реальных атмосферных задачах смесь паров и среды-носителя можно считать идеальным газом. Используя уравнение состояния идеального газа, несложно получить выражение для парциального давления паров, входящее в формулы (6.34), (6.36):

$$p_v = p_{v0} \left[\frac{(a+1-x_0)(1-x)}{(a+1-x)(1-x_0)} \right].$$

Рассмотрим все фазовые переходы в смешанном облаке (пар-лед, лед-вода, пар-вода) и запишем уравнение теплового баланса $dE + P dV = dQ$. После некоторых преобразований несложно получить, что все тепловыделение в облаке происходит за счет переходов лед-вода и пар-вода, поэтому переход пар-лед можно фактически считать виртуальным. Окончательно уравнение теплового баланса имеет следующий вид (см. разд. 2.3):

$$d_t \left\{ -T_s [ac_m + (1-x_i-x_w)c_v + x_i c_i + x_w c_w] - \frac{U_i x_i}{R} - \frac{U_w x_w}{R} \right\} = -Pd_t \{ (a+1-x)T/P \}, \quad (6.38)$$

где переохлаждение $T_s = 273,16 \text{ К} - T$, а в качестве теплоемкостей взяты их средние значения в диапазоне от $273,16 \text{ К}$ до T . Для того, чтобы левая часть уравнения (6.38) представляла собой полный дифференциал, мы внесли теплоемкости под знак производной. В области температур, характерных для облачных процессов, это приближение вносит относительную погрешность в несколько процентов.

Формулировка основных уравнений для численной модели кинетики конденсации. Помимо уравнений роста частиц (6.35)–(6.37) и уравнения теплового баланса (6.38) замкнутая система уравнений, описывающих конденсацию, должна содержать уравнения массового баланса, учитывающее распределение массовой концентрации по фракциям и сохранение суммарной массы конденсирующегося вещества в облаке.

Представим ледяную и водяную фракции в виде некоторого количества частиц, имеющих различные размеры и свои концентрации для каждого размера. Пусть в спектре в начальный момент существуют M_i частиц льда и M_w — капель воды. Концентрацию j -й частицы льда обозначим через n_{ij0} , массу j -й частицы — g_{ij} , b_{ij} — поправку (6.37) для j -й частицы, x_{ij} — степень конденсации j -й частицы. Аналогичные обозначения примем и для водяной фракции.

$$d_t g_{ij} = \frac{1}{\{1+b_{ij}\}} (d_t g_{ij})_0; \quad d_t g_{wf} = \frac{1}{\{1+b_{wf}\}} (d_t g_{wf})_0,$$

$$d_t \left\{ -T_s [ac_m + (1-x_i-x_w)c_v + x_i c_i + x_w c_w] - \frac{U_i x_i}{R} - \frac{U_w x_w}{R} \right\} = -Pd_t \{ (a+1-x)T/P \}, \quad (6.39)$$

$$g_{wf} n_{wf0} = \rho_0 x_{wf}, \quad g_{ij} n_{ij0} = \rho_0 x_{ij}, \quad x_i = \sum_{j=1}^{M_i} x_{ij}, \quad x_w = \sum_{f=1}^{M_w} x_{wf}.$$

В этих формулах индекс j пробегает значения $1, \dots, M_i$, а индекс f — значения $1, \dots, M_w$. Все ОК с радиусом меньше критического $r_* = 2\sigma q/kT \ln S$, где $S = p_v/P_s$, будут испаряться, закритические — расти. Если какая-либо группа ОК с номером m испарится полностью, т. е. получится решение $g_{wm} \leq 0$, то в системе (6.39) надо полагать $g_{wm} = 0$ и решать ее далее для льда и оставшихся капель воды.

Система уравнений (6.39) описывает кинетику конденсации в смешанном облаке при произвольных температурах. В частности, для ее использования при положительных температурах и описания процессов конденсации ОК нужно просто положить $M_i = 0$. Большое значение для применения системы (6.39) в практических задачах имеют начальные данные. В атмосферных условиях первоначальный рост ОК идет в основном на ядрах конденсации, которых в атмосфере достаточно много — до 10^{10} м^{-3} (Mason, 1957, Junge, 1963). При отрицательных температурах часть необходимых ядер конденсации может «активироваться» и выступать в качестве льдообразующих ядер конденсации (ICN), на которых происходит непосредственная сублимация пара. Однако, концентрации ICN обычно много меньше, чем общие концентрации ядер конденсации (Prupacher and Klett, 1997).

Анализ ряда экспериментальных данных по формированию капель в облаках (Вульфсон и др., 1973; Warner, 1973; Willis and Hallett, 1991) показывает, что лагранжевы объемы, в которых происходит формирование осадков, обычно представляют собой термические неоднородности (термики), движущиеся вверх со значительной вертикальной скоростью от 1 до 10 м/с. Давление внутри такого объема может сильно уменьшаться, а температура будет сильно падать и становиться отрицательной, независимо от выделения теплоты конденсации. При отрицательных температурах замерзание капель за счет попадания иммерсионных ядер на поверхность или в объем капли, которое определяется коагуляцией, непосредственно учитывается в уравнениях (6.32), (6.33). Для систем с температурами ниже -15 – -20°C , в дополнение к изложенному выше, следует рассмотреть процессы спонтанного промерзания капель (Cotton, 1972; Shiino, 1978).

Модель спонтанного промерзания капель. Для описания процессов спонтанного промерзания капель нами использованы результаты работы (Shiino, 1978), согласно которым доля промерзших капель диаметра d от общего числа таких капель при переохлаждении T_s определяется следующим выражением:

$$\frac{n_*(d)}{n(d)} = 1 - \exp\left(-\frac{\pi d^3 K(T_s)}{6}\right), \quad K(T_s) = W_s \exp(a_s T_s), \quad (6.40)$$

где W_s и a_s — экспериментальные константы, переохлаждение $T_s = 273,16 \text{ К} - T$, $n_*(d)$ — концентрация промерзших капель диаметра d , n — суммарная концентрация таких капель. В (Shiino, 1978) рекомендованы следующие значения параметров W_s и a_s для воды: $W_s = 1,67 \cdot 10^4 \text{ м}^{-3}$, $a_s = 0,8 \text{ К}^{-1}$.

Выражение (6.40) не дает явного вида дополнительного источника для уравнений конденсации (6.39). При численной реализации во избежание сильного усложнения численного алгоритма нами был принят упрощенный (пороговый) критерий мгновенного промерзания капель с $n_*(d)/n > f$. Таким образом, в ходе расчетов для каждой группы ОК находится величина (6.40), и если она оказывается больше какого-либо заданного значения $0 < f < 1$ (например, $f = 0,5$), то вся группа объявляется промерзшей и пополняет спектр ЛЧ. При этом M_w уменьшается на единицу, а M_i , соответственно, увеличивается. Путем вариации значений f в расчетах мы можем проверить, насколько сильно зависит динамика промерзания капель от этой величины. Получение одной и той же динамики для различных значений f должно свидетельствовать о приемлемости порогового критерия.

Модель фазового перехода при $T = 0^\circ\text{С}$. Для термиков, поднимающихся в атмосфере с медленно падающей по высоте температурой, а также для систем, находящихся при постоянном объеме или давлении, конденсация идет на фоне повышения температуры внутри термика. Тем самым, в ходе конденсации температура может достичь 0°С , после чего начинается плавление льда. Этот процесс мы будем рассматривать поэтапно по частицам, т.е. считать, что сначала происходит таяние ледяных частиц с меньшими размерами, затем — далее по возрастанию размеров (такая последовательность взята в соответствии с тем, что частицы меньшего размера тают быстрее). При этом удобно считать, что частицы пронумерованы по возрастанию размеров (можно занумеровать их так с самого начала или упорядочить). Пусть на каком-либо этапе происходит плавление j -й частицы льда, а $j - 1$ частиц льда уже расплавились. В процессе таяния льда в облаке могут присутствовать: M_w капель воды, существовавших при отрицательных температурах (если к этому моменту они не испарились), относящиеся к ним величины обозначим индексом «w1»; $M_i - j$ еще не растаявших частиц льда; $j - 1$ капель воды, образовавшихся при таянии льда, и водные капли, образовавшиеся из растаявших ледяной частицы с номером j (относящиеся к ним величины обозначим индексом «w2»); еще не растаявшая j -я ледяная частица. В процессе таяния происходит уменьшение концентрации частиц льда n_{ij} и одновременный рост концентрации водных капель n_{w2j} , образующихся при таянии льда. При этом будем считать, что при выделении тепла ледяные частицы тают мгновенно; тем самым скорость уменьшения концентрации n_{ii} определяется скоростью выделения тепла при конденсации.

Отметим, что поправки (6.37) — разные для льда и воды. Однако если учитывать этот эффект, то получится, что из тающей ледяной частицы образуется не одна, а несколько водных капель, что приводит к постоянному «размножению» частиц и к сильному усложнению модели. Поэтому для водных капель, образовавшихся из растаявших ледяных частиц с номером j , и еще не растаявших ледяных частиц j скорость конденсации $(d_t g)_{w2i}$ возьмем одинаковой. Естественно представить эту скорость в виде следующего среднего:

$$(d_t g)_{w2i} = \frac{n_{ij} d_t g_{ij} + n_{w2i} d_t g_{w2j}}{n_{ij} + n_{w2j}}.$$

Система уравнений, описывающая процессы при 0°C , имеет вид:

$$\begin{aligned} d_t g_{im} &= \frac{1}{\{1 + b_{im}\}} (d_t g_{im})_0, & d_t g_{w1s} &= \frac{1}{\{1 + b_{w1s}\}} (d_t g_{w1s})_0, \\ d_t g_{w2f} &= \frac{1}{\{1 + b_{w2f}\}} (d_t g_{w2f})_0, & d_t g_{ij} &= d_t g_{w2j} = (d_t g)_{w2i}, \\ d_t \left\{ -\frac{U_i x_i}{R} - \frac{U_w (x_{w1} + x_{w2})}{R} \right\} &= -P d_t \{ (a + 1 - x) T / P \}, \\ n_{ij} + n_{w2j} &= n_{ij0} \left(\frac{T_0}{T} \right) \left\{ \frac{a + 1 - x_0}{a + 1 - x} \right\}, \\ x_{w1s} &= \frac{n_{ws0} g_{w1s}}{\rho_0}, & x_{w2f} &= \frac{g_{w2f} n_{if0}}{\rho_0}, & x_{im} &= \frac{g_{im} n_{im0}}{\rho_0}, \\ x_i &= \sum_{j=1}^{M_i} x_{ij}, & x_{w1} &= \sum_{s=1}^{M_w} x_{w1s}, & x_{w2} &= \sum_{f=1}^{j-1} x_{w2f} + x_{w2j}, \\ x &= x_{w1} + x_{w2} + x_i, \\ x_{w2j} &= \left(\frac{T}{T_0} \right) \left\{ \frac{a + 1 - x}{a + 1 - x_0} \right\} \frac{g_{w2j} n_{w2j}}{\rho_0}, \\ x_{ij} &= \left(\frac{T}{T_0} \right) \left\{ \frac{a + 1 - x}{a + 1 - x_0} \right\} \frac{g_{ij} n_{ij}}{\rho_0}. \end{aligned} \quad (6.41)$$

В этих уравнениях индекс j фиксирован, индекс m пробегает значения $j + 1, \dots, M_i$, индекс s — значения $1, \dots, M_w$; f — значения $1, \dots, j - 1$; температура фиксирована: $T = 0^\circ\text{C}$. Плавление j -й частицы льда закончится, когда концентрация этих ледяных частиц n_{ij} станет нулевой (или в результате численного решения формально зайдет в область отрицательных значений; в этом случае необходимо занулить концентрацию таких частиц). Когда закончится плавление j -й частицы, надо увеличить j на единицу и рассматривать таяние следующей частицы льда. Процесс плавления всей ледяной фракции закончится,

когда расплавится M_i -я частица льда. После плавления в облаке могут присутствовать M_w капель воды, формирование которых началось при отрицательных температурах, и M_i капель воды, образовавшихся из растаявшего льда. Дальнейший рост ОК описывается системой (6.39), в которой число ОК равно $M_w + M_i$, а число ЛЧ равно нулю.

Метод $x - T$ -диаграмм. В реальных атмосферных процессах для роста ледяных частиц важную роль играет так называемый механизм Wegener–Bergeron–Findeisen, который обеспечивает перегонку (передачу молекул пара) от водяных капель к ледяным частицам за счет разности скоростей конденсации для этих фаз. Этот механизм носит также название *distillation* пара в терминах работы (Mason, 1957) или *redistribution of material* (перегонка) в терминах работы (Bell and Ford, 2000). Он используется при искусственном засеве переохлажденных водяных облаков льдообразующими реагентами для сильного роста ледяных частиц и инициирования осадков (Mason, 1957; Качурин, Морачевский, 1965; Dennis, 1980).

В работах (Пискунов, Петров, Голубев, 2001; Piskunov, Petrov, Golubev, 2003) нами найдены критерии, при выполнении которых будут эффективными способы искусственного воздействия на облачную систему с использованием ее засева льдообразующими реагентами, основанные на эффекте *redistribution of material*. Для наглядной иллюстрации и интерпретации этих критериев предложен метод $x - T$ -диаграмм, с помощью которого легко графически исследовать основные стадии конденсационных процессов и прогнозировать параметры финального состояния.

Основные стадии процесса конденсации и параметры финального состояния удобно исследовать с помощью диаграмм на плоскости x (степень конденсации) — T (температура). Изобразим на осях $x - T$ кривые насыщения $x_s(T)$ и решения уравнения теплового баланса (6.38) $x_{bi}(T)$, $x_{bw}(T)$ для ледяной и водяной фракций. Оказывается, что взаимное расположение, ход и пересечение этих кривых наглядно иллюстрируют динамику процесса и определяют предельные $x - T$ точки. Для иллюстрации рассмотрим систему с постоянным давлением, т. е. в уравнении (6.38) положим $P = \text{const}$:

$$d_t \left\{ -T_s[ac_m + (1 - x_i - x_w)c_v + x_i c_i + x_w c_w] - \frac{U_i x_i}{R} - \frac{U_w x_w}{R} \right\} = -d_t \{(a + 1 - x)T\}. \quad (6.42)$$

Уравнение кривой насыщения найдем из соотношений: $p_v(T) = P_s(T)$, $x_s = (\rho - \rho_s)/\rho$, $\rho = \rho_0 V_0/V$, $\rho_s = P_s A_v/RT$. После некоторых преобразований получим:

$$x_{sj}(T) = \frac{R\rho_0(a + 1 - x_0)T_0 - P_{sj}(T)A_v(a + 1)}{R\rho_0(a + 1 - x_0)T_0 - P_{sj}(T)A_v}, \quad (6.43)$$

где символ j принимает значения i и w . Уравнение (6.43) дает вид кривой насыщения для ситуации, когда в облаке находятся либо водяные капли и нет льда, либо есть ледяные частицы и нет водяных капель. Уравнение (6.43) описывает кривую финальных состояний, поскольку процесс конденсации заканчивается при достижении насыщения.

Формулы для $x_{bi}(T)$ и $x_{bw}(T)$ получим из преобразованного уравнения теплового баланса (6.42), полагая в нем $x_w = 0$ и $x_i = 0$ соответственно:

$$x_{bj}(T) = \frac{(T - T_0)[c_v + 1 + a(c_m + 1)] + x_0 T_0 + \sum_k x_{k0} [-T_{s0}(c_v - c_k) + U_k/R]}{-T_s(c_v - c_j) + T + U_j/R}, \quad (6.44)$$

где символы j и k принимают значения i и w , индексом «0» отмечены величины, относящиеся к начальному моменту времени. Кривая $x_{bw}(T)$ определяет зависимость степени конденсации воды от температуры в ситуации, когда в облаке конденсируются только водяные капли и нет льда; $x_{bi}(T)$ описывает аналогичную ситуацию для ледяных частиц.

Если две кривые (6.44) продолжить до их пересечения с осью T , то эти точки пересечения совпадают. Процесс конденсации прекращается, когда пар становится насыщенным, т. е. $x = x_s$. Если изобразить $x_{bw}(T)$ и $x_{sw}(T)$ в осях $x - T$, то можно графически найти параметры, при которых закончится процесс конденсации в водяные капли. Эти параметры соответствуют точке пересечения кривых $x_{bw}(T)$ и $x_{sw}(T)$. Аналогично можно определить финальные параметры для ситуации, когда в облаке присутствуют только ледяные частицы. Кривые (6.44) являются мажорантами, они описывают ход процессов в двух крайних случаях: когда в облаке находятся водяные капли и нет льда и наоборот — есть лед и нет воды. В том случае, когда на плоскости $x - T$ графически изображен процесс и с каплями, и с ледяными частицами, график ляжет между этими кривыми. Основное удобство метода $x - T$ -диаграмм состоит в том, что ход процесса конденсации и финальные состояния можно оценивать, не прибегая к решению уравнений роста (6.39), (6.41), а пользуясь только соображениями теплового баланса и свойствами кривых насыщения. Отметим также, что для метода $x - T$ -диаграмм не важен конкретный вид спектров ОК и ЛЧ.

Применение метода $x - T$ -диаграмм предложено и проиллюстрировано в (Пискунов, Петров, Голубев, 2001; Piskunov, Petrov, Golubev, 2003) на ряде задач с типичными параметрами облака. Приведем некоторые общие результаты.

1. Сначала рассмотрим ситуацию, когда в облаке в начальный момент не было ни ледяных, ни водяных частиц и началось их формирование на центрах конденсации, т. е. положим $x_{i0} = 0$, $x_{w0} = 0$ (отметим, что для построения $x - T$ -диаграмм и исследования стадий процесса не требуется знать концентрации льдо- и водообразующих центров конденсации). Рисунок 6.1 иллюстрирует ход процесса в этом случае.

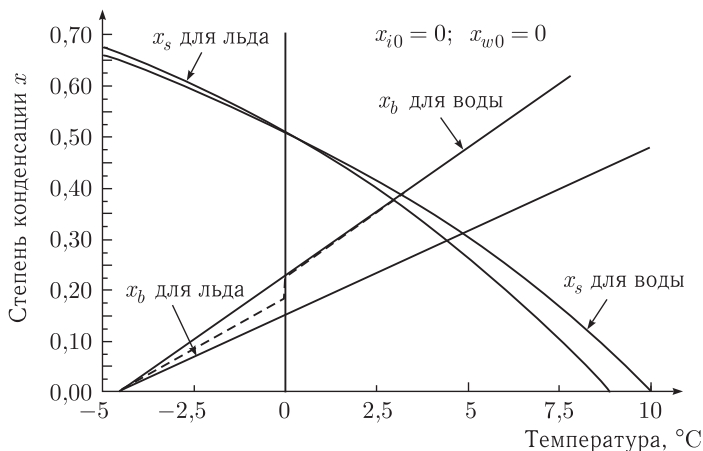


Рис. 6.1. Область изменения основных величин; поведение степени конденсации и температуры в случае $x_{i0} = 0$, $x_{w0} = 0$

На рисунке изображены $x_{bw}(T)$ и $x_{bi}(T)$, кривые насыщения $x_{sw}(T)$ и $x_{si}(T)$. Пунктиром изображен ход процесса, полученный из расчета системы (6.41). Как видно из рисунка, процесс проходит следующие стадии: при отрицательных температурах происходит конденсация пара и в водяные капли, и в ледяные кристаллы, при 0°C происходит таяние льда, после чего в облаке остаются водяные капли и процесс продолжается по $x_{bw}(T)$ до пересечения с $x_{sw}(T)$. Начальные условия таковы, что на рисунке точки пересечения $x_{bw}(T)$ и $x_{sw}(T)$, $x_{bi}(T)$ и $x_{si}(T)$ находятся при положительных температурах. В любой аналогичной ситуации процесс будет иметь похожие стадии развития: рост водяных капель и ледяных кристаллов, таяние льда, конденсация пара в водяные капли до насыщения, которое произойдет при положительных температурах. Ледяные кристаллы на завершающей стадии отсутствуют.

2. Возможна также ситуация, когда точка пересечения $x_{bw}(T)$ и $x_{sw}(T)$ находится при отрицательной температуре, а точка пересечения $x_{bi}(T)$ и $x_{si}(T)$ — при положительной. Такой случай реализуется, в частности, когда $x_{i0} = 0$, $x_{w0} = 0,5$. На рис. 6.2 проиллюстрировано поведение системы при этих начальных условиях. Ход процесса следующий: сначала происходит рост водяных капель и ледяных кристаллов (рост степени конденсации происходит в основном за счет воды и на диаграмме процесс изображен по $x_{bw}(T)$), затем пар приходит в равновесие с водой, но является пересыщенным по отношению ко льду, поэтому водяные капли начинают испаряться, а ледяные кристаллы продолжают расти (процесс изображен вблизи $x_{sw}(T)$) до тех пор, пока пар не придет в равновесие со льдом, что в данном случае происходит

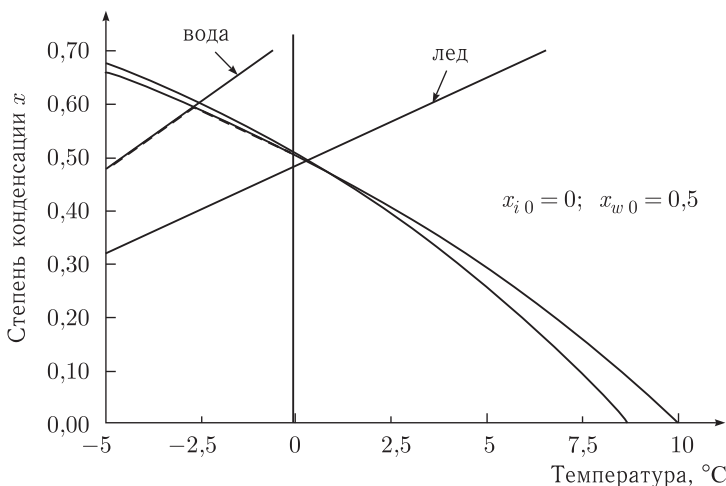


Рис. 6.2. Зависимость степени конденсации от температуры в случае $x_{i0} = 0$, $x_{w0} = 0,5$

при 0°C — т.е. в облаке останутся и водяные капли, и ледяные кристаллы.

3. Возможна и третья ситуация: обе точки пересечения $x_{bw}(T)$ и $x_{sw}(T)$, $x_{bi}(T)$ и $x_{si}(T)$ находятся при отрицательных температурах. Такой случай реализуется, в частности, когда $x_{i0} = 0$, $x_{w0} = 0,6$ и он проиллюстрирован на рис.6.3. Ход процесса следующий: сначала происходит рост водяных капель и ледяных кристаллов (рост степени конденсации происходит в основном за счет воды и на рисунке процесс идет практически вдоль кривой $x_{bw}(T)$), затем пар приходит в равновесие с водой, но является пересыщенным по отношению ко льду, поэтому водяные капли начинают испаряться, а ледяные кристаллы продолжают расти (процесс идет вблизи $x_{sw}(T)$). Процесс заканчивается полным испарением водяной фракции при отрицательных температурах на кривой $x_{bi}(T)$ в точке ее пересечения с $x_{si}(T)$ — в облаке остаются ледяные кристаллы и нет водяных капель, которые испарились в результате перегонки. В любой аналогичной ситуации (точки пересечения $x_{bw}(T)$ и $x_{sw}(T)$, $x_{bi}(T)$ и $x_{si}(T)$ находятся при отрицательных температурах) процесс будет иметь похожие стадии развития.

Три перечисленных случая описывают все возможные взаимные расположения кривых (6.43) и (6.44) на $x - T$ -диаграммах и исчерпывают возможные исходы конденсационных процессов.

Наиболее эффективный рост небольшого числа ледяных кристаллов наблюдается, когда процесс заканчивается при отрицательной температуре и все водяные капли испаряются, что происходит, если рас-

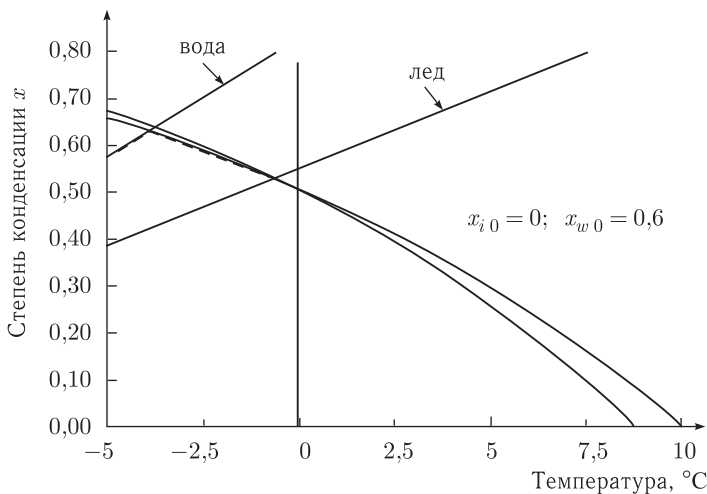


Рис. 6.3. Поведение степени конденсации и температуры в случае $x_{i0} = 0$, $x_{w0} = 0,6$

положение кривых на $x - T$ -диаграмме аналогично третьему случаю, когда точки пересечения $x_{bw}(T)$ и $x_{sw}(T)$, $x_{bi}(T)$ и $x_{si}(T)$ находятся при отрицательных температурах. Практически такой же результат достигается и во втором случае. При этом точка пересечения кривых $x_{bw}(T)$ и $x_{sw}(T)$ находится при отрицательной температуре, а точка пересечения $x_{bi}(T)$ и $x_{si}(T)$ — при положительной; процесс конденсации приводит к формированию смешанного облака с температурой $T = 0^\circ\text{C}$. Это условие является общей характеристикой начального состояния в облаке, когда можно добиться значительного укрупнения небольшого числа льдообразующих ядер конденсации (ЛОЯК) за счет испарения ансамбля водяных капель. Проверку этого условия очень легко и наглядно провести на $x - T$ -диаграмме. Итак, сильная перегонка пара от водяных капель к ледяным кристаллам и эффективный рост ледяных кристаллов будут наблюдаться, когда:

- существует переохлажденное водяное облако с небольшими концентрациями ЛОЯК;
- начальные условия таковы, что на $x - T$ -диаграмме точка пересечения кривых $x_{bw}(T)$ и $x_{sw}(T)$ находится при отрицательной температуре.

Времена процессов сильно зависят от того, происходит перегонка пара от водяных капель к ледяным частицам, или нет. Численные расчеты системы уравнений (6.41) для конкретных условий показали (Пискунов, Петров, Голубев, 2001), что, например, в первом случае, когда перегонка не наблюдалась, процесс занял ~ 1 с, а во втором и третьем случаях процессы оказались весьма длительными: $\sim 27\,000$ с

и ~ 8000 с соответственно. При этом уже необходимо учитывать влияние коагуляции, а также возможность изменения внешних условий, в которых находится облако.

Таким образом, с помощью метода $x - T$ -диаграмм можно прогнозировать ход конденсационных процессов и оценивать параметры финальных состояний системы, не проводя расчеты о формировании спектров ОК и ЛЧ. Для этого достаточно знать только влагосодержание в облаке, плотность среды-носителя и начальную температуру. Для систем с переменным давлением необходимо еще знать поведение давления со временем.

Глава 7

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ ОСАДКОВ В ОБЛАКАХ

Или, когда угрюм орган,
На небе слышен барабан,
И войско туч пудов на двести
Лежитверху на каждом месте,
Когда могучих вод поток
Сшибает с ног лесного зверя, —
Сами себе еще не веря,
Мы называем это: Бог.

Н. Заболоцкий. Поэма дождя

В своих строках поэт иронично и очень точно отметил страх человека перед мощными стихийными процессами в атмосфере, его растерянность и стремление одушевлять непонятные явления. Возникшая у С. Лема идея о живом океане — Солярисе — зачастую представляется достаточно реальной, в особенности специалистам, занимающимся физикой атмосферы и океана и сталкивающимся с их стохастическим поведением. Напомним, что стохастическими называются объекты и явления, которые ведут себя нерегулярно, с большим вкладом случайных и вероятностных процессов.

Нерегулярность атмосферных и, как следствие, облачных процессов служит серьезным затруднением для создания и применения детерминированных моделей и методов численного моделирования в этой области. Однако, серьезность погодных и климатических проблем (наводнения, засухи, град, грозы) в жизни человека настойчиво требует умения понимать и моделировать эти процессы. До последнего времени это моделирование носило чисто эмпирический характер, что зачастую не позволяло обнаружить качественные причины явлений и дать полную количественную информацию. Возможности фундаментального подхода намного шире, но платой за это является большая трудоемкость и сложность: требуется создание и постоянное развитие теоретических моделей, необходима численная реализация этих моде-

лей в виде программных комплексов и пакетов программ и, наконец, должна проводиться проверка расчетов на сложных полномасштабных экспериментах. Ясно, что развитие фундаментальных моделей стало возможным только в последнее время в связи с прогрессом в создании мощных вычислительных средств.

В 50-е годы в США интенсивно рекламировалась деятельность, связанная с применением аэрозолей для искусственного воздействия на облачные процессы (засев облаков) и борьбы с засухой. В основе этой деятельности лежало желание использовать неустойчивость и огромные запасы энергии атмосферных облачных систем путем засева облаков искусственными ядрами конденсации. Успешные полномасштабные опыты были проведены в засушливых штатах США и в Австралии. Как уже упоминалось в гл. 1, после постоянного применения засева облаков в течение нескольких лет этот метод перестал давать результаты, и даже наблюдалась обратная картина с повышением длительности засушливых периодов. Однако, кратковременные искусственные воздействия на облака не лишены смысла. Начиная с 60-х годов, мы можем видеть хорошую погоду над столицей «по заказу». Известны также успехи по борьбе с градом в горных районах с помощью специальных пушек, выбрасывающих йодистые соединения металлов. Это несколько не противоречит сказанному выше, поскольку здесь речь идет о локальных изменениях, не нарушающих глобального баланса.

7.1. Выбор облачных экспериментов для моделирования

Таким образом, занимаясь моделированием облачных процессов, мы можем иметь в виду не только разработку фундаментального подхода к описанию этих явлений, но и возможность применения результатов для локального воздействия на облака и борьбы с нежелательными эффектами, такими как град, молнии, плохая видимость и др. В целом проблема моделирования облачных процессов может быть разбита на три группы задач:

- моделирование газодинамических и конвективных течений в облачных системах с учетом тепловлагообмена;
- моделирование кинетики формирования и динамики выпадения облачных капель (ОК) и ледяных частиц (ЛЧ);
- моделирование электростатических явлений и электродинамических процессов.

В основном мы будем говорить о второй группе задач, имея в виду, что кинетика формирования осадков должна рассматриваться на фоне газодинамических течений и с учетом тепловых эффектов. Помимо неопределенности, связанной с нерегулярностью атмосферных процессов, большие трудности представляет собой создание самих моделей кинетики формирования ОК и ЛЧ (кинетики нуклеации, конденсации и коагуляции). В последнее время благодаря усилиям теоретиков, мате-

матиков и быстрому развитию вычислительной техники эти проблемы достаточно успешно решаются с помощью подхода, использующего решение соответствующих нелинейных кинетических уравнений и применение моделей, изложенных в предыдущих главах.

В средних широтах облака обычно находятся на высотах в несколько километров и даже в летнее время температуры в них отрицательны. Тем самым, облачная влага конденсируется как в виде ОК, так и ЛЧ, что вызывает принципиальные трудности для моделирования. В таких смешанных системах нужно учитывать процессы промерзания ОК при их столкновениях с ЛЧ, иметь в виду что ОК метастабильны вплоть до температур -40°C и сами по себе они промерзают только за счет флуктуаций. Большое значение для образования осадков имеет процесс «перегонки» конденсата от ОК к ЛЧ, возникающий из-за разности давлений насыщенного пара над водой и над льдом (эффект Ленгмюра–Бержерона). Этот эффект обеспечивает формирование осадков в смешанных облаках за счет роста небольшого числа крупных ледяных кристаллов и их дальнейшего выпадения из облака. Фундаментальные модели, количественно описывающие эти процессы и эффекты, были разработаны в работах (Piskunov and Petrov, 2002; Piskunov et al., 2003, Пискунов, 2004) и их основные моменты были изложены в гл. 6.

Первоначальная оценка того, насколько конкретная облачная система «перспективна» для искусственного воздействия, оказывается более простой задачей, не требующей кинетических расчетов. В разд. 6.4 описан метод $x - T$ -диаграмм, с помощью которого легко изобразить графически ход процесса и прогнозировать параметры финального состояния для ОК и ЛЧ в облаке. На основе расчетов найдены критерии, при выполнении которых будут эффективными способы искусственного воздействия на облачную систему с использованием ее засева льдообразующими реагентами.

Описанные в разд. 6.4 сложные кинетические модели требуют проверки в условиях полномасштабных облачных экспериментов. Для сравнения выбрано два таких эксперимента: Сыктывкарский (наблюдалась и зондировалась группа кучевых капельных облаков) (Вульфсон и др., 1973) и в штате Монтана (исследовалось кучево-дождевое смешанное облако) (Dye J.E. et al., 1986). Общие данные об этих экспериментах схематично показаны на рис. 7.1, 7.2; полученные экспериментальные результаты подробно описаны в (Вульфсон и др., 1973; Dye J.E. et al., 1986; Piskunov and Aloyan, 2002; Гайнуллин и др., 2003; Piskunov et al., 2003).

В работе (Вульфсон и др., 1973) приведены результаты измерений внутри 57 развивающихся и распадающихся кучевых облаков в районе Сыктывкара. Эксперименты проводились в течение одного дня 10.07.70 на самолете ИЛ-14. Самолет горизонтально пролетал сквозь верхние части облаков, не опускаясь ниже верхней трети мощности каждого из 57 обследованных облаков. С борта самолета измерены следую-

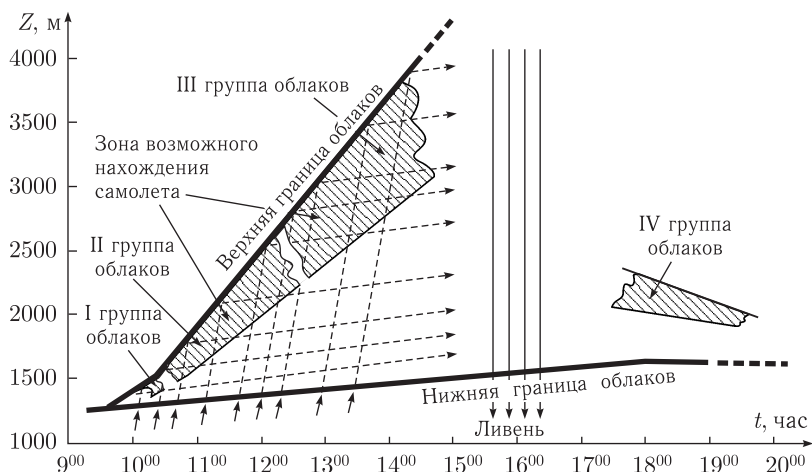


Рис. 7.1. Развитие кучевых облаков в районе Сыктывкара 10.07.1970 (Вульфсон и др., 1973). Пунктиром указаны траектории подъема некоторых термиков

щие характеристики: горизонтальные размеры R восходящих потоков (термиков) и капельных облачных зон, разница температур между ними ΔT , концентрация облачных капель (спектр) для 10 интервалов, интегральная водность.

Эксперимент «Монтана» (Dye et al., 1986) представлял собою уникальную попытку детального наблюдения за развитием и распадом изолированного кучево-дождевого облака с помощью четырех самолетов, планера и трех радаров. Облако сформировалось на высоте 3,9 км и в течение 15–20 мин достигло высоты 10,6 км. Такая высота позволила проследить конденсацию паров воды, замерзание ОК и формирование осадков в виде снега. Поскольку скорость верхней границы облака была сравнима со скоростью подъема воздуха внутри него, то имеется возможность задания по известным данным измерений траектории отдельных непересекающихся лагранжевых объемов (молей) и в рамках автономных расчетов проследить конденсацию и льдообразование внутри них. Наибольшее число измерений в этом эксперименте относится к интегральным характеристикам облака (водность, ледность, концентрация ОК и льда и т. п.). Дифференциальный спектр ОК в семи группах представлен лишь для одного самолета (Gardiner et al., 1985). Для расчетов в рамках полуторамерной и двумерной численных методик имеются данные по зондированию атмосферы. Однако, приведенные в статьях разрезы облака свидетельствуют о наличии явно несимметричного нисходящего потока, что, вообще говоря, ограничивает применимость этих методик для полного исследования всех стадий развития облака.

В автономных расчетах кинетики формирования ОК и ЛЧ выделялись лагранжевы объемы (термики), которые поднимались во внешнем

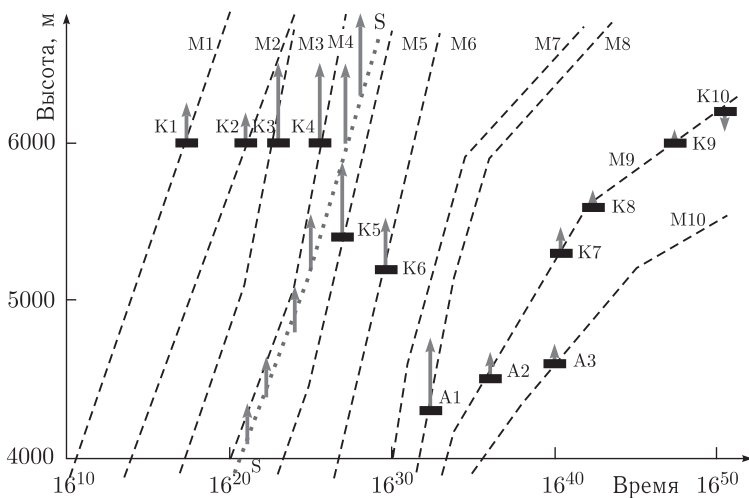


Рис. 7.2. Эксперимент «Монтана». Распределение ветра (вертикальные стрелки); расположение самолетов А (пролеты А1–А3); К (пролеты К1–К10); штриховые линии — траектории подъема условных термиков (М1–М10); пунктирная линия — путь планера S

поле температур, и производилось усреднение спектров по соответствующим группам термиков. На рис. 7.1, 7.2 показаны траектории подъема некоторых термиков, наряду с зонами и траекториями пролета самолетов через облака. Кроме того, проводились расчеты кинетики формирования ОК и ЛЧ в составе полуэмпирических 1.5D- и 2D-моделей конвективного облака, описанных в (Piskunov and Aloyan, 2002). Дальнейшее содержание главы основано на результатах работ (Гайнуллин и др., 2003; Piskunov et al., 2003).

7.2. Сыктывкарский эксперимент, результаты моделирования

Описание эксперимента. В день эксперимента, 10.07.1970, в районе Сыктывкара с утра наблюдалась безоблачная погода. Приблизительно в 9 ч 30 мин по местному времени на высоте 1100–1200 м начали зарождаться кучевые облака. До 10 ч 30 мин мощность облаков не превышала 150 м. Затем облака стали быстро развиваться, и к 14 часам отдельные из них достигли стадии кучево-дождевых и имели мощность 5000–6000 м. Высота основания облаков в этот момент была 1400–1500 м. Максимального развития облака достигли к 16 часам. Приблизительно в это время в районе Сыктывкара наблюдалась гроза с сильным ливнем (см. рис. 7.1.) После прохождения грозы осталось поле кучевых и слоисто-кучевых облаков (7–8 баллов) мощностью 300–500 м и высотой основания ~ 1700 м.

Самолет горизонтально пролетал сквозь верхние части облаков, не опускаясь ниже верхней трети каждого из 57 обследованного облака. Примерное расположение самолета внутри облаков указано на рис. 7.1 для каждой из четырех групп облаков (заштрихованные области). Измерения проведены для четырех групп облаков: с 10 ч 23 мин до 10 ч 30 мин (I группа), с 10 ч 53 мин до 11 ч 57 мин (II группа), с 12 ч 04 мин до 13 ч 54 мин (III группа), с 17 ч 26 мин до 19 ч 10 мин (IV группа, распадающийся облака). Конвективные потоки определялись как зоны с несколько большей температурой, чем окружающий облачный воздух. Регистрировались интегральные концентрации капель диаметрами соответственно больше 3, 5, 10, 15, 27 и 32, 38, 52, 57, 70 мкм. Измеритель влажности позволял осуществлять регистрацию как в теплых, так и в переохлажденных (до 15 °C) облаках в диапазоне от 0,15 до 5 г/см³ с постоянной времени 2 с. Необходимо отметить, что все данные усреднены внутри каждой группы и относятся к некоему обобщенному облаку, а не к конкретному объекту.

Автономные расчеты. В качестве начального этапа численного моделирования наибольший интерес представляет сравнение результатов эксперимента с автономными расчетами, в которых условный «моль» влажного воздуха поднимается вверх по заданной «траектории». Из рис. 7.1 можно оценить скорости поднятия нижней границы облака $U_{нг} = 0,02$ м/с и верхней $U_{вг} = 0,17$ м/с. В автономных расчетах полагаем, что конвективные потоки «входят» в облако на высоте нижней границы $H_{нг}$, проходят вертикально вверх с постоянной скоростью W до верхней трети облака, далее равномерно замедляются вплоть до верхней границы $H_{вг}$, затем медленно всплывают со скоростью $U_{нг}$. Приведенные в статье (Вульфсон и др., 1973) данные позволяют оценить характерную скорость подъема потока W , а также необходимые для задания граничных условий температуру и давление на «входе» (на нижней границе облака). Эта процедура подробно описана и проведена в (Гайнуллин и др., 2003).

Получаемая при этом зависимость давления внутри «моля» от времени позволяет провести серию автономных расчетов формирования спектра ОК по программе AERFORM. Каждый расчет этой серии соответствовал одному из условных «молей», которые последовательно «стартовали» в течение дня через 15 мин. Начальные параметры отдельного «моля» соответствовали конкретным условиям для выбранного местного времени «старта» (см. рис. 7.1) в следующих пределах: высота нижней границы $H_{нг} = 1200\text{--}1400$ м, температура $T_{нг} = 5\text{--}6^\circ$, давление $P_{нг} = 841\text{--}873$ мбар, высота верхней границы $H_{вг} = 1300\text{--}4000$ м.

Начальный спектр континентальных атмосферных аэрозолей был взят состоящим из частиц Айткена и степенного спектра Юнге. В автономных расчетах все частицы считались нерастворимым остовом: конденсация на них происходила при превышении давления

паров над насыщенным давлением (для данного размера), а испарение было возможным только до определенного размера остова. Анализ результатов расчетов показал, что в этих предположениях конденсация идет на более крупных аэрозолях (на степенной части спектра Юнге), несмотря на то, что на частицы Айткена приходится $\sim 95\%$ от общего числа задаваемых начальных частиц. При сравнении с данными Сыктывкарского эксперимента полная концентрация аэрозолей взята равной $5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-3}$.

В рамках автономного расчета имеется возможность учета коагуляции ОК за счет турбулентности. Его величина задается через величину скорости диссипации энергии турбулентности, которая в этих расчетах имела фиксированные значения 100, 300 или $500 \text{ см}^2/\text{с}^3$. Очевидно, что в рассмотренной постановке не учитывается вовлечение и термодинамические характеристики окружающего воздуха, седиментация и т.п. однако, их можно учесть в рамках более полных методик, например, полуторамерной (см. далее).

Поскольку неизвестно положение самолета относительно восходящего потока, и в работе (Вульфсон и др., 1973) приведены усредненные по группе данные измерений, то сравнивались расчетные спектры, усредненные по всем условным «молям» в группе в течение всего времени возможного пребывания самолета. С этой целью в каждой группе облаков проводились расчеты для последовательно стартовавших «молей» и результаты усреднялись. Наиболее интересными нам представляется сравнение расчетов с экспериментом для III-й группы облаков, поскольку в этой группе капли уже достаточно хорошо сформированы.

Приведенные в (Гайнуллин и др., 2003) результаты усреднения расчетов совместно с экспериментальными кумулятивными спектрами ОК для восходящих потоков в III-й группе облаков показывают, что расчетные спектры ОК заметно зависят от скорости диссипации энергии турбулентности. Наилучшее совпадение (не хуже двух раз) с экспериментальными точками наблюдается для $\varepsilon = 100 \text{ см}^2/\text{с}^3$. Аналогично, для всего облака в целом (при этом добавлена стадия медленного подъема и усреднение произведено через 500 с в течение всего времени нахождения «моля» в зоне возможного пребывания самолета) имеется хорошее согласие (не хуже 2–3 раз) для ОК с радиусом более 10 мкм. Для ОК меньшего радиуса наблюдается значительное (до 5 раз) превышение экспериментальных значений по сравнению с расчетом для $\varepsilon = 100 \text{ см}^2/\text{с}^3$. По нашему мнению, причиной последнего расхождения может быть:

- слишком большой интервал времени измерения и усреднения спектров ОК в эксперименте;
- существенное влияние тепломассообмена облака с окружающим воздухом;

- большой разброс высоты измерения и усреднения в группе III (см. рис. 7.1).

Другие возможные причины расхождения будут обсуждены в следующем разделе. Отметим, что согласие результатов для групп I и II даже лучше, чем для группы III (Гайнуллин и др., 2003), но здесь мы их не приводим.

Таким образом, в целом согласие кумулятивных расчетных и экспериментальных спектров ОК следует считать хорошим, поскольку масштаб изменения размера ОК равен 10^8 в расчетах и 10^2 в эксперименте, а масштаб изменения интегральной концентрации ОК равен 10^6 в расчетах и 10^5 в данных эксперимента. Отметим также, что в проведенных автономных расчетах на этих интервалах времени не зафиксированы крупные капли, способные к седиментации, что подтверждается отсутствием осадков для групп облаков I, II, III. Сильный дождь пошел примерно через 2 ч после завершения измерений в группе III (см. рис. 7.1).

Расчеты по полуторамерной модели. Для расчетов эволюции конвективного облака в условиях эксперимента (Вульфсон и др., 1973) в работе (Гайнуллин и др., 2003) использовалась динамическая часть полуторамерной модели (Кароль и др., 2000; Shiino, 1978), а в качестве микрофизического блока использовалась программа AERFORM. Напомним, что в динамических уравнениях полуторамерной модели (Кароль и др., 2000; Shiino, 1978) учитывается конвективный и турбулентный перенос, влияние упорядоченного вовлечения и турбулентного перемешивания с окружающей атмосферой.

На рис. 7.3 представлено сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными (Вульфсон и др., 1973) по кумулятивным спектрам частиц. Видно, что расчетные данные неплохо соответствуют экспериментальным. Основные отличия наблюдаются, как уже отмечалось для автономных расчетов, в мелкодисперсной части спектра. Одной из возможных причин этого отличия может быть неучет влияния растворимых ядер конденсации. Для выяснения этого вопроса был проведен специальный расчет по модели (Кароль и др., 2000), модифицированной с учетом влияния растворимой компоненты на скорость конденсации. В этом расчете задавался монодисперсный спектр ядер конденсации радиусом 0,05 мкм и эффективным (Мазин и Шмелер, 1983) радиусом $r_3 = 0,04$ мкм, что моделировало растворимые частицы Айткена. Последнее значение соответствует 50 % содержанию сульфата аммония. Их концентрация была принята постоянной и равной $0,6 \times 10^9 \text{ м}^{-3}$, что примерно соответствует рекомендованному в (Mészáros, 1978) значению с учетом естественного убывания концентрации аэрозоля с высотой. Результатам этого расчета соответствует кривая 3 на рис. 7.3. Как видно, учет растворимой компоненты действительно позволяет объяснить концентрации капель в мелкодисперсной части спектра, но дает результаты в крупнодисперсной части, существенно

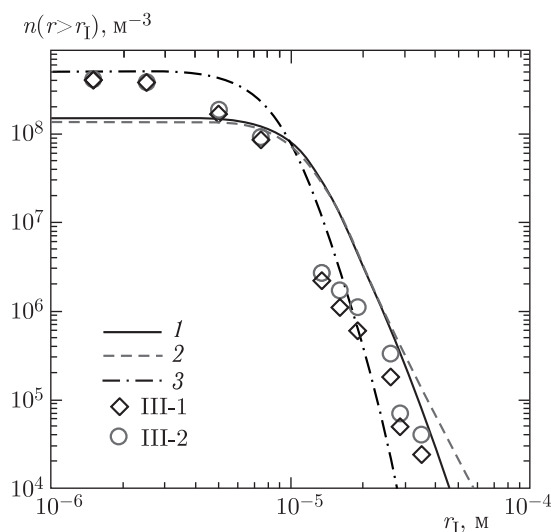


Рис. 7.3. Кумулятивные спектры на высоте 2200 м на моменты времени 20 мин (кривая 1) и 40 мин (кривая 2). III-1 — средние по облаку и III-2 — средние по капельной зоне экспериментальные данные. Кривая 3 — расчет с частично растворимыми ядрами конденсации

отличающиеся от эксперимента. Проведенный анализ позволяет сделать вывод, что реалистичное описание спектров облачных капель возможно только при достаточно полном описании спектров ядер конденсации как с учетом их распределения по размерам, так и неоднородности их химического состава. Детальное изучение процессов конденсации на ядрах неоднородного состава требует дальнейших исследований.

Расчеты по двумерной модели. Проводились расчеты по двумерной модели, разработанной М. А. Затевахиным и описанной в (Piskunov and Aloyan, 2002). Параметры атмосферы и распределений аэрозольных частиц по размерам и высоте были приняты такими же, как и при проведении расчетов по полуторамерной модели. В начальный момент времени задавался сферический объем радиуса 100 м, все параметры которого, кроме температуры, соответствовали параметрам невозмущенной атмосферы, а температура соответствовала перегреву 2°C на уровне подстилающей поверхности. Все расчеты были проведены на пространственной сетке 21×41 с числом узлов в пространстве масс 41. Дополнительные расчеты, проведенные по полуторамерной модели, показали, что такой сетки достаточно для решения задачи.

На рис. 7.4 показаны поля водности на различные моменты времени, которые иллюстрируют динамику процесса конденсации. Хорошо видно развитие процесса, начинающееся после пересечения термиком

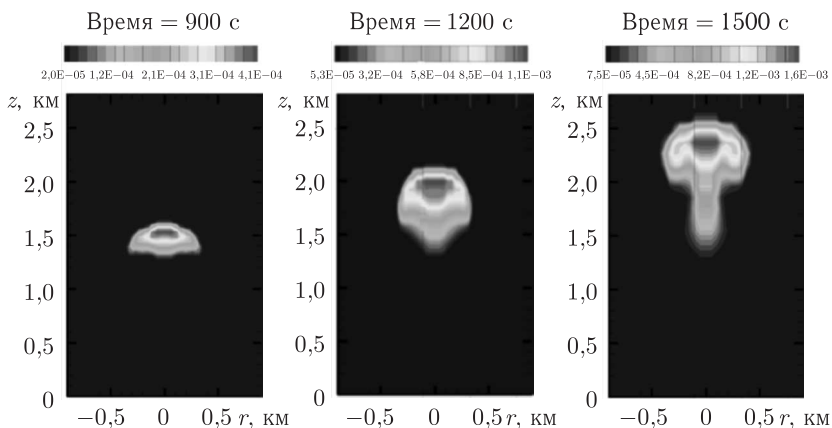
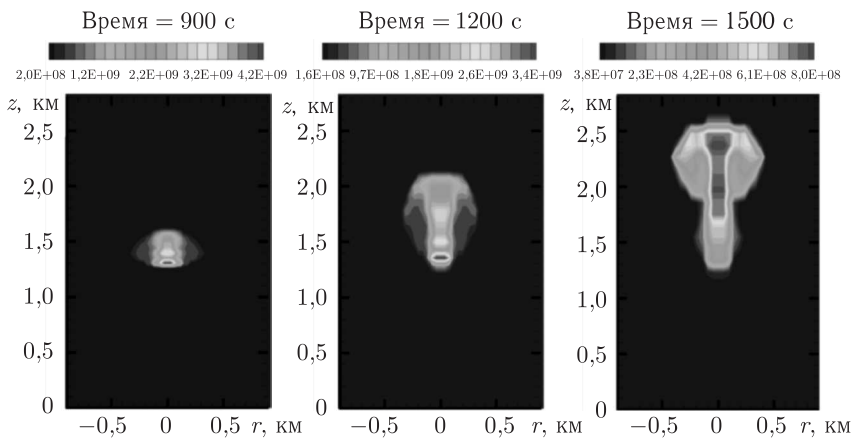


Рис. 7.4. Поля водности, г/г, на различные моменты времени

уровня конденсации (1350 м). Для сравнения были проведены расчеты этого же варианта с использованием модели (Затевахин, 2001), основанной на использовании равновесного подхода к описанию процессов конденсации. Результаты, полученные в этом случае, оказались близкими к приведенным на рис. 7.4, что позволяет сделать вывод о равновесном характере этого процесса. Как следствие этого, остальные газодинамические параметры термика в этих вариантах также были близки. Данные результаты согласуются также с приведенными выше результатами полутримерной модели. Полученная в расчетах водность облака порядка 0,0012 г/г.

На рис. 7.5 приведены пространственные распределения концентраций облачных капель. В начале процесса конденсации максимальная

Рис. 7.5. Поля концентрации капель, $1/\text{м}^3$, на различные моменты времени

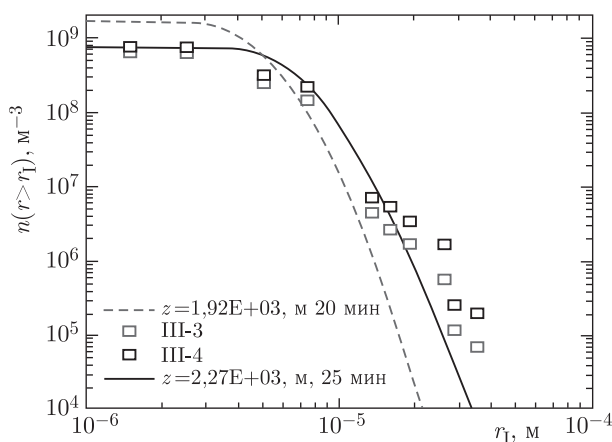


Рис. 7.6. Кумулятивные спектры капель на различные моменты времени III-3 — средние из максимальных значений в термике. III-4 — абсолютный максимум в группе экспериментальных данных (Вульфсон и др., 1973)

концентрация капель наблюдается в районе уровня конденсации. Затем она сдвигается в область максимальной влажности в районе оси симметрии. Пересыщение в облаке составляет примерно 0,4 %, что хорошо согласуется с данными, полученными в расчетах по полуторамерной модели.

На рис.7.6 представлено сопоставление расчетных кумулятивных спектров капель с экспериментальными данными (Вульфсон и др., 1973). Видно, что к 25 минуте развития процесса расчетный спектр хорошо согласуется с экспериментом.

Заключение по разделу 7.2. Проведено численное моделирование процесса формирования облачных капель применительно к эксперименту, в котором изучалась структура кучевых облаков на различных стадиях их развития. С помощью численной программы AERFORM описано изменение спектра капель за счет кинетики процессов конденсации и коагуляции капель. Спектры капель при таком подходе рассчитываются путем решения соответствующих кинетических уравнений на фоне изменения газодинамических и термодинамических параметров облака. Сравнение результатов проведено как в автономных лагранжевых расчетах, так и в рамках так называемой «полуторамерной» численной методики. Показано хорошее согласие между расчетными и экспериментальными данными по кумулятивным спектрам облачных капель. Проведено также сравнение с результатами расчетов, в которых для описания микрофизических облачных процессов используются методы параметризации.

Применение различных физических моделей для определения термодинамических и газодинамических параметров облака и описание кинетических процессов на этом фоне показывают, что процесс форми-

рования облачных капель в Сыктывкарском эксперименте был устойчивым и хорошо воспроизводимым в расчетах по этим моделям.

Основным итогом проведенного численного моделирования, по нашему мнению, следует считать подтверждение того факта, что программа AERFORM применима для описания микрофизических процессов в облачных системах и обладает рядом методических преимуществ по сравнению с моделями, использующими упрощенное описание нуклеации.

Совпадение результатов расчетов спектров ОК по программе AERFORM с реально измеренными спектрами следует признать удовлетворительным. Следует также отметить, что детальное изучение процессов конденсации на растворимых ядрах может существенно повысить точность расчетов и данные Сыктывкарского эксперимента дают хороший предмет для дальнейшего сравнения результатов численного моделирования с опытом.

7.3. Эксперимент Монтана, результаты расчетов

Экспериментальные данные. Эксперимент был проведен 19.07.1981 в штате Монтана, США. Измеряемое изолированное кучевое облако, характерное для летнего периода данной местности, имело диаметр 6–8 км и примерно к 16 ч 30 мин местного времени достигло максимума своего развития, после чего оно дало осадки, в основном в виде снега и ледяной крупы. Облако характеризуется значительным перепадом высот, температур и давлений. Скорость подъема воздуха в облаке достигала 10 м/с. В эксперименте участвовали планер, четыре самолета и три радара. Результаты измерений приведены в работах (Dye et al., 1986; Gardiner et al., 1985). Общая схема, иллюстрирующая измерения в эксперименте, приведена на рис. 7.2.

Данные зондировки и однородность эквивалентной потенциальной температуры по измерениям планера указывают на применимость лагранжевых расчетов на стадии подъема облака, без учета вовлечения окружающего воздуха. Анализ данных по скоростям подъема воздуха внутри облака позволил построить картину распределения ветра по времени и высоте. На основе этих данных нами были построены 10 гипотетических линий подъема термиков в облаке, которые показаны на рис. 7.2. Наиболее информативными являются термики, которые условно обозначены нами М4 и М9, и для которых проведены расчеты кинетики формирования осадков.

Термик М 4 стартовал с высоты основания облака 3900 м в момент времени в 16 ч 20 мин 00 с. В 16 ч 27 мин 00 с он достиг высоты 6900 м. По его траектории двигался планер. Термодинамические параметры термика находились из системы дифференциальных уравнений для равновесного адиабатического (с учетом тепловыделения при фазовых переходах) подъема. В результате найдена зависимость давления

(или плотности воздуха) от высоты и времени. Расчеты по равновесной методике проводились как для варианта выделения теплоты конденсации, так и для полной сублимации. В рассматриваемом диапазоне температур 0–(–20) °C существенны оба процесса. Нами получено, что измерения планера лежат в вилке возможных значений.

Термик М9 «стартовал» с высоты 3900 м в момент времени в 16 ч 33 мин 30 с. В 16 ч 35 мин 30 с на высоте 4500 м его пересек самолет Aerocommander. Далее на высотах 5300, 5600, 6000 и 6100 м он последовательно пересекался самолетом King Air в моменты времени соответственно: 16.40; 16.42; 16.48 и 16.50. На высоте 4500 м его пересек самолет Aerocommander. Далее на высотах 5300, 5600, 6000 и 6100 м он последовательно пересекался самолетом King Air.

Постановка и результаты расчетов. Появление ЛЧ может быть обусловлено сублимацией пара на ICN. При этом формирование ЛЧ будет происходить за счет конденсационного роста ЛЧ на ядрах ICN и коагуляции ОК с ЛЧ. В этой постановке основной является задача определения концентрации ICN на высотах 4,3–4,5 км при температуре $T \approx -2^\circ\text{C}$. Отметим, что в данных условиях в атмосфере присутствует достаточно большое число необводненных частиц Айткена (до $10^8\text{--}10^9\text{ м}^{-3}$), однако далеко не все они являются сублимирующими ядрами (активируются). Ряд зависимостей, дающих значения концентраций ICN в зависимости от температуры и пересыщения, приведен в (Pruppacher and Klett, 1997). Однако, рассчитанные по этим формулам концентрации ICN при указанных температурах и имеющихся в облаке пересыщениях незначительны и не превышают 10^3 м^{-3} , в то время как по нашим расчетам хорошее совпадение с экспериментальными данными получено для гораздо больших (на несколько порядков) начальных концентраций ICN. В той же работе (Pruppacher and Klett, 1997) указывается на ряд аномалий в поведении концентраций ICN — так называемые IN-storms, которые характеризуются внезапным увеличением концентраций ICN в течение дня (или меньшего периода) на несколько порядков по сравнению с типичными значениями. По этой причине мы сочли возможным варьировать начальную концентрацию ICN, несколько завысив ее по сравнению с данными работы (Pruppacher and Klett, 1997). Хорошее совпадение с экспериментальными данными получилось, если брать в качестве ICN частицы Айткена с концентрацией $N_0 = 10^6\text{ м}^{-3}$. Такое количество ICN могло появиться, например, как результат IN-storms; не исключено также, что повышенная их концентрация связана с таким химическим составом ядер в эксперименте, который стимулирует сублимацию пара на ядрах.

В таблицах 7.1–7.2 показаны результаты расчетов (Piskunov et al., 2003) для термиков М4, М9 с заданием ICN и их сравнение с имеющимися экспериментальными данными. Там же приведены результаты расчетов по модели (Кароль и др., 2000), которые обозначены «мод». Все результаты расчетов не только воспроизводят общий ход процессов

Таблица 7.1. Сравнение экспериментальных и расчетных данных для термика М9

Высота, км	5,3	5,6	6,0	6,1
N ЛЧ расч., л ⁻¹	440	520	174	68
N ЛЧ эксп., л ⁻¹	29,3	—	63,8	45,3
N ОК расч., см ⁻³	648	574	284	207
N ОК мод., см ⁻³	680	430	116	112
Ледность расч., г/м ³	0,03	0,01	0,9	1,2
Ледность-мод., г/м ³	1	1,07	1,06	1,05
Водность расч., г/м ³	1,3	1,4	0,9	0,7
Водность-мод., г/м ³	1,2	1,2	1,1	1,1
Водность-эксп., г/м ³	0,34	0,04	0,06	0,04

Таблица 7.2. Сравнение экспериментальных и расчетных данных для термика М4

Высота, км	4,5	5,3	6,1	6,9
Ледность расч., г/м ³	0,0046	0,01	0,034	0,087
Ледность-мод., г/м ³	0,006	0,08	0,37	0,8
N ЛЧ расч., л ⁻¹	135	330	390	428
N ЛЧ мод., л ⁻¹	0,3	3,5	61	200
Водность расч., г/м ³	0,73	1,8	2	2,4
Водность мод., г/м ³	0,88	1,27	1,55	1,48
Водность-эксп., г/м ³	0,8	1,5	2	2,4
N ОК расч., см ⁻³	740	650	560	460
N ОК мод., см ⁻³	422	237	220	199

и правильно отражают поведение основных величин. Наилучшее совпадение получено для термика М4. По-видимому, это связано с тем, что в этом случае экспериментальные данные хорошо подходят для сравнения с лагранжевыми расчетами, поскольку измерения проводились на планере, который фактически сопровождал термик М4 вдоль всей траектории.

Поведение с высотой расчетных массовых концентраций и средних радиусов ОК и ЛЧ для термика М9 представлено на рисунках 7.7 и 7.8. Как видно из рис. 7.7, начиная с высоты ~ 5,6 км происходит уменьшение массовой концентрации ОК и быстрый рост массовой концентрации ЛЧ. Это обусловлено тем, что, начиная с высоты ~ 5,5 км, скорость подъема термика в атмосфере уменьшается почти в 3 раза, поэтому увеличивается время его подъема. В такой ситуации усиливается влияние процессов коагуляции и становится более заметным «промерзание»

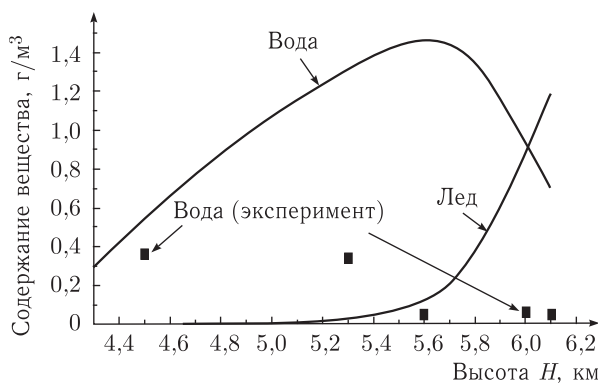


Рис. 7.7. Зависимость водности и ледности от высоты для термика М9

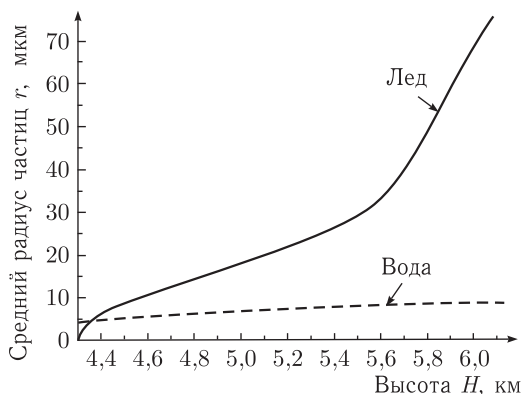


Рис. 7.8. Поведение среднего радиуса частиц с высотой в термике М9

ОК за счет их коагуляции с ЛЧ. Кроме того, наши расчеты показали, что на высотах $\sim 5,8$ км очень активно идет процесс *redistribution of material*. Медленный рост среднего размера ОК (см. рис. 7.8) при этом в основном обусловлен конденсационным ростом крупных ОК и их коагуляцией ОК между собой.

Поведение с высотой расчетных массовых концентраций и средних радиусов ОК и ЛЧ для термика М4 представлено на рис. 7.9 и 7.10. Видно, что такого резкого уменьшения массовой концентрации ОК и быстрого роста массовой концентрации ЛЧ, как для термика М9, не происходит. Дело в том, что скорость подъема термика М4 с высотой увеличивается и «промерзания» ОК за счет их коагуляции с ЛЧ практически не происходит из-за малого времени коагуляции.

На рис. 7.11, 7.12 показано сравнение расчетных и экспериментальных спектров ОК для обоих термиков на высоте 4,5 км. Отметим, что все результаты расчетов неплохо совпадают как с экспериментальными

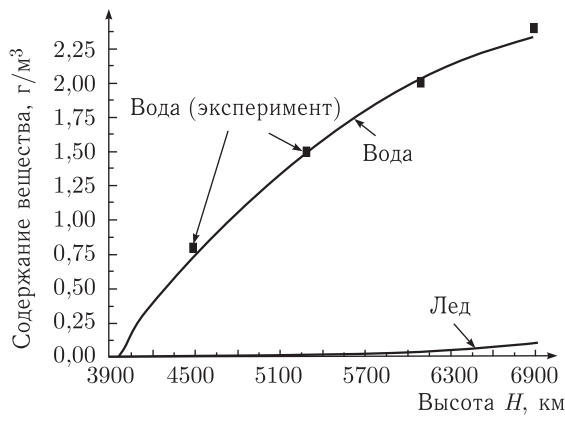


Рис. 7.9. Зависимость водности и ледности от высоты для термика М4

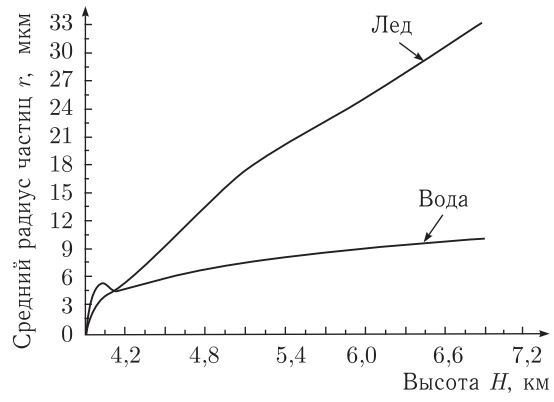


Рис. 7.10. Поведение среднего радиуса частиц с высотой в термике М4

результатами, так и с расчетами по моделям (Кароль и др., 2000), воспроизводя не только качественную картину процессов, но и обнаруживая количественное согласие. Наилучшее совпадение получено для термика М4. По-видимому, это связано с тем, что в этом случае экспериментальные данные хорошо подходят для сравнения с лагранжевыми расчетами, поскольку измерения проводились на планере, который фактически сопровождал термик М4 вдоль всей траектории. Следует также отметить, что использование единых констант для расчетов по термикам М4 и М9 позволяет получить результаты, согласующиеся как с экспериментальными данными, так и с расчетами по другим моделям.

Для качественной иллюстрации картины формирования и выпадения осадков в эксперименте «Монтана» на рис. 7.13 приведено сравнение расчетов по 1.5D-модели с экспериментальными данными по

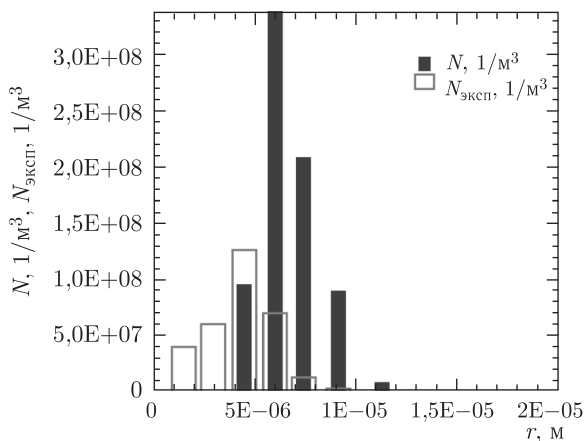


Рис. 7.11. Сравнение между расчетными и экспериментальными спектрами ОК для термита М4 на высоте 4,5 км

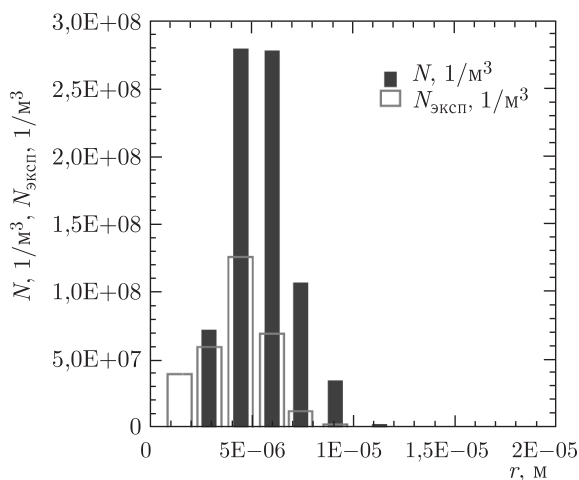


Рис. 7.12. Сравнение между расчетными и экспериментальными спектрами ОК для термита М9 на высоте 4,5 км

поведению радиолокационной отражаемости (в условных единицах). Результаты численного моделирования формирования ОК и ЛЧ и выпадения осадков, полученные по двумерной модели с детальной микрофизикой (Затевахин, 2001), показаны на рис.7.14, где приведена пространственная картина распределения ОК и ЛЧ в облаке на два момента времени. Из рис.7.13 видно хорошее совпадение с экспериментом, а рис.7.14 наглядно иллюстрирует динамику промерзания ОК в облаке: сначала ЛЧ в незначительном количестве находятся

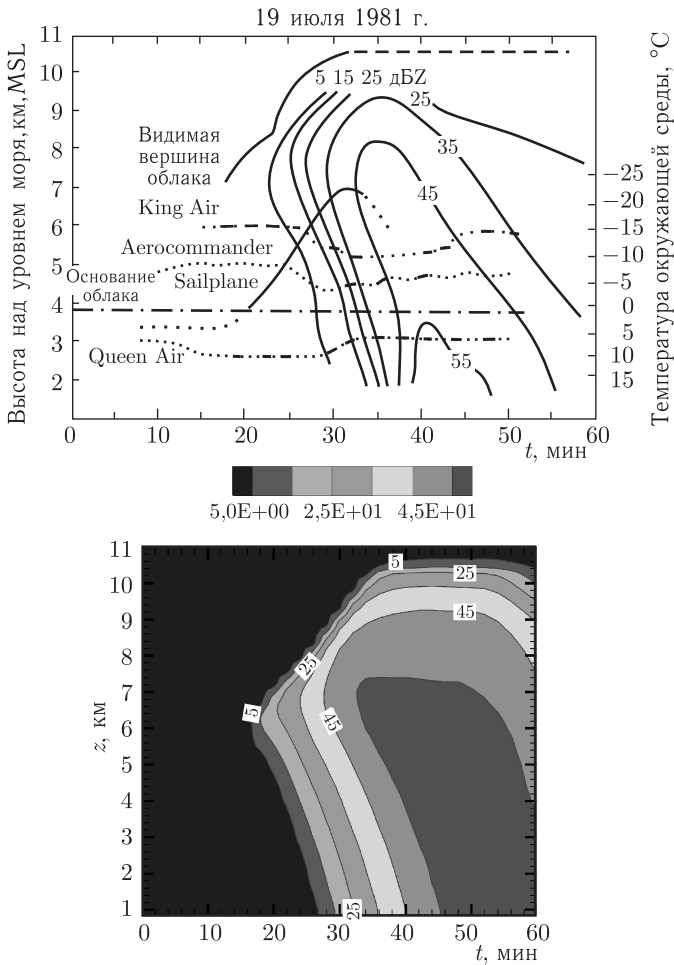


Рис. 7.13. Динамика изменения радиолокационной отражаемости, дБЗ, в эксперименте «Монтана». Вверху — экспериментальные данные (Dye et al., 1986), внизу — данные, полученные по 1.5D-модели

в холодной верхней части облака; на более поздний момент практически все ОК «перегнались» в ЛЧ, при этом ЛЧ захватывают все облако и начинают выпадать через нижнюю границу.

Описанные выше результаты получены в ходе работ по международному проекту «Mathematical simulation of atmospheric pollutants mesoscale transport and transformation: kinetics of aerosol formation in clouds» (Piskunov and Aloyan, 2002). Они докладывались на международных конференциях и опубликованы в работах (Piskunov et al., 2003, Пискунов, 2004). По результатам расчетов можно констатировать, что

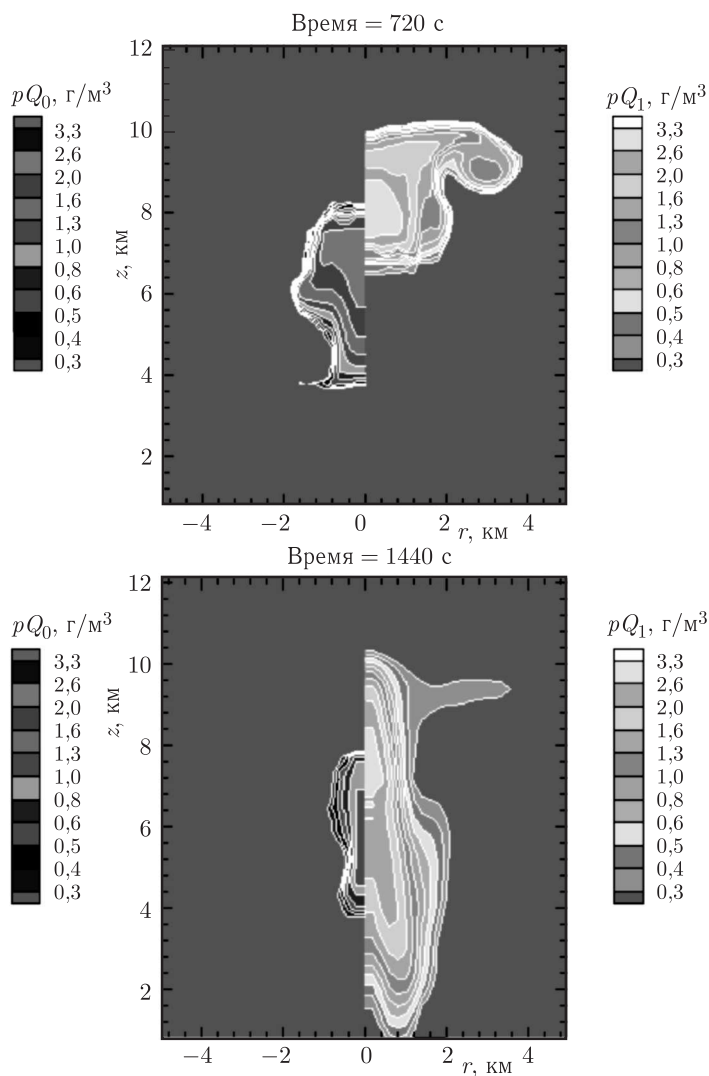


Рис. 7.14. Пространственное распределение водности (слева) и ледности (справа), г/м^3 , в расчетах по 2D-модели, на моменты времени 12 мин и 24 мин

проведенное моделирование правильно отражает поведение основных величин, а в некоторых случаях, обнаруживает полное численное согласие.

Нам представляется, что фундаментальный подход к моделированию атмосферных облачных процессов имеет несомненные перспективы и он будет дальше развиваться и совершенствоваться в научном

отношении, а также применяться на практике. К очевидным достоинствам этого подхода относится возможность проверки различных технических решений и проектирование устройств в области борьбы со стихийными бедствиями без дорогостоящих и сложных экспериментов. Можно пофантазировать и представить себе целенаправленное уничтожение грозových разрядов, создание стабильной хорошей видимости на аэродромах, разработку удобных устройств против обледенения и т. д.

Глава 8

ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ ПРОЦЕССОВ ОСАЖДЕНИЯ АЭРОЗОЛЕЙ

В суету городов и в потоки машин
Возвращаемся мы — просто некуда деться!
И спускаемся вниз с покоренных вершин,
.....
Что же делать — и боги спускались на Землю!
В. Высоцкий

Для решения задач атмосферного переноса аэрозолей, которые частично уже рассматривались в разд. 1.7, требуются граничные условия, которые определяются процессами осаждения аэрозолей на граничных поверхностях. Особенно это актуально для переноса в условиях городской застройки и внутри помещений, где осаждение идет на развитой поверхности. Ведущими механизмами осаждения при этом остается броуновская диффузия в пограничном слое и седиментация (см. разделы 1.3, 1.4), а также добавляется турбофорез (см. далее). Ниже, основываясь на результатах работы (Piskunov, 2009), даны рецепты нахождения скоростей осаждения аэрозолей в широком диапазоне размеров и внешних условий. Результаты полезны для решения задач, рассматриваемых в гл. 10.

8.1. Обзор данных

В расчетах процессов осаждения аэрозолей в условиях городской застройки (Kosovic et al., 2005; Yang and Shao, 2008; Jonsson, Karlsson and Jönsson, 2008) и внутри помещений (Chen, Yu and Lai, 2006; Gao and Niu, 2007; Zhao and Wu, 2007) необходимы формулы для скоростей сухого осаждения, удовлетворяющие достаточно разнообразным требованиям:

- возможность расчета для осаждения на вертикальные стены и горизонтальные поверхности;
- возможность расчета для разных степеней шероховатости поверхности (z_0 от 0 до 1 м) и произвольного размера частиц (d от 10^{-8} м до 10^{-3} м);

— простота формул, позволяющая проводить расчеты в режиме реального времени.

Имеется целый ряд работ (Davies, 1966; Sehmel, 1973; Liu and Agarwal, 1974; Sehmel and Hodgson, 1978; Slinn, 1978; Sehmel, 1980; Wood, 1981; Wood, 1981a; Slinn, 1982; Johansen, 1991; Fan and Ahmadi, 1993; Kharchenko, 1997; Sippola and Nazaroff, 2002), в которых скорости осаждения на вертикальные и горизонтальные стенки описываются с помощью полуэмпирических зависимостей. В основном, эти зависимости определялись по результатам экспериментов по турбулентному осаждению в трубах и каналах. Наиболее полные данные получены в работах (Sehmel, 1973; Sehmel and Hodgson, 1978; Slinn, 1978), включая эксперименты на открытой поверхности. Отметим, что в полуэмпирических формулах не всегда удастся определить пределы их применимости и учесть полный набор физических эффектов, возникающих в турбулентном пограничном слое.

Наиболее привлекательны теоретические модели, в которых рассматривается физическая картина движения и осаждения частиц в пристеночном слое, формируемом вблизи поверхности. В таких моделях появляется возможность учесть эффекты движения частиц в неоднородном поле турбулентности (турбофорез), включая инерционность движения частиц в турбулентных пульсациях. Среди наиболее полных моделей такого рода следует назвать обобщенную Эйлерову теорию, представленную в (Guha, 1997). Однако, данная теория сложна для замыкания и использования в рамках численных комплексов, рассчитывающих 2D, 3D картину турбулентных течений в условиях городской застройки. Наиболее оптимальным было бы иметь замкнутую автономную методику расчета скорости осаждения, которая использовала бы минимум входных параметров.

Важным шагом в этом направлении является работа (Lai and Nazaroff, 2000), в которой рассматривается осаждение частиц на горизонтальные и вертикальные поверхности помещений в случае, когда турбофорезом пренебрегается. Если в прикладных расчетах требуется детальное описание только респиральной фракции аэрозолей, опасной при вдыхании, данная модель может служить простым и удобным инструментом.

Наиболее серьезный вклад в создание моделей осаждения, простых для использования и, одновременно, учитывающих весь набор практически важных факторов, сделан в работах (Zhao and Wu, 2006a, Zhao and Wu, 2006b). В работе (Zhao and Wu, 2006a) предложена усовершенствованная эйлерова модель, предсказывающая скорость осаждения частиц на стены в развитом турбулентном потоке. Модель использует разбиение пограничного слоя на три зоны и включает в себя описание эффектов турбофореза, броуновской и турбулентной диффузии, а также седиментации. Использовано соотношение, связывающее скорость турбофореза с временем торможения, скоростью трения и нормальным расстоянием к поверхности. Предсказанные

результаты хорошо согласуются с данными измерений для внутренних поверхностей зданий и для вертикальных стен каналов. Модель удобна и оперирует с комбинацией безразмерных величин. Единственные входные параметры — скорость трения и необходимая информация о частицах (диаметр, плотность). Дальнейшее развитие этой модели выполнено в (Zhao and Wu, 2006b), где с помощью корректировки граничных условий дополнительно учтено влияние шероховатости. Однако, данная корректировка работает лишь для небольших значений z_0 , поэтому в реальных расчетах осаждения на шероховатые поверхности приходится обращаться к полуэмпирическим моделям.

В последнее время проведен ряд экспериментов по осаждению аэрозолей в лабораторных установках (test chamber), которые подтверждают результаты перечисленных выше теоретических работ. Так в работе (Lai and Nazaroff, 2005) исследовано осаждение частиц с размерами 0,9–9 мкм на вертикальные стенки с шероховатостью z_0 от 10 до 250 мкм. В работе (Hussein et al., 2009) исследовано осаждение частиц с размерами 0,05–10 мкм на гладкие стенки. В обеих работах скорость трения u^* была небольшой — от 1 до 12 см/с. Результаты неплохо согласуются с предсказаниями работ (Lai and Nazaroff, 2000; Zhao and Wu, 2006a; Zhao and Wu, 2006b).

Таким образом, получение рабочих формул для сухого осаждения аэрозолей в широком диапазоне внешних условий неизбежно требует сочетания теоретических и полуэмпирических подходов, а также процедуры согласования этих подходов между собой. Попытка решения этой задачи представлена в работе (Piskunov, 2009). За основу взяты классические работы (Sehmel, 1973; Sehmel and Hodgson, 1978; Slinn, 1978) и теоретические модели (Lai and Nazaroff, 2000), Zhao and Wu (2006a, 2006b), разработанные сравнительно недавно.

8.2. Аналитические формулы для скоростей осаждения на гладкие поверхности

Краткое описание модели Zhao and Wu (2006a). Перечислим для определенности основные уравнения модели (Zhao and Wu, 2006a) и наиболее важные предположения. Далее будем использовать обозначения работы (Zhao and Wu, 2006a), лишь для скоростей сделаем замену v на u . Поток частиц j на границу в модели определяется следующим образом:

$$j = -(\varepsilon_p + D) \frac{\partial C}{\partial y} - i u_g C + V_t C, \quad (8.1)$$

где C — концентрация частиц; y — координата по нормали к поверхности; ε_p , D — коэффициенты турбулентной и броуновской диффузии частиц соответственно; i характеризует тип поверхности (0 — вертикальная, 1 — горизонтальная (пол), -1 — горизонтальная (потолок));

u_g — скорость седиментации частиц; V_t — скорость турбофореза, которую при соответствующих упрощениях можно представить в виде (Guha, 1997)

$$V_t = -\tau_p \frac{du_{py}^2}{dy}, \quad (8.2)$$

где τ_p — время релаксации (торможения) частицы, а $\overline{u_{py}^2}$ — усредненный квадрат пульсационной скорости частицы в направлении y . Важными предположениями, используемыми в модели для описания инерционного движения частиц в турбулентных пульсациях, являются связи между характеристиками турбулентных пульсаций среды и флуктуационным движением частиц:

$$\overline{u_{py}^2} = \overline{u_y^2} \left(1 + \frac{\tau_p}{\tau_L}\right)^{-1}, \quad \frac{\varepsilon_p}{\nu_t} = \left(1 + \frac{\tau_p}{\tau_L}\right)^{-1}, \quad (8.3)$$

где τ_L — лагранжев временной масштаб турбулентности; ν_t — турбулентная вязкость. Обозначим через C_∞ концентрацию вдали от пограничного слоя, введем скорость осаждения

$$u_d = j/C_\infty, \quad (8.4)$$

и безразмерные величины, которые мы будем снабжать индексом «+»:

$$C^+ = \frac{C}{C_\infty}, \quad y^+ = \frac{yu^*}{\nu}, \quad u_d^+ = \frac{u_d}{u^*}, \quad \overline{u_{py}^2}^+ = \frac{\overline{u_{py}^2}}{u^{*2}},$$

$$\tau^+ = \frac{\tau_p u^{*2}}{\nu}, \quad \overline{u_y^2}^+ = \frac{\overline{u_y^2}}{u^{*2}}, \quad \text{Sc} = \frac{\nu}{D}, \quad \nu_t^+ = \frac{\nu_t}{\nu},$$

где ν — молекулярная вязкость среды; Sc — число Шмидта; u^* — скорость трения. Использование безразмерных переменных делает решение более универсальным и облегчает анализ результатов.

В безразмерных переменных уравнение (8.1) с учетом определения (8.4) принимает вид

$$u_d^+ = \frac{dC^+}{dy^+} \left[\left(\frac{\tau_L}{\tau_L + \tau_p} \right) \nu_t^+ + \text{Sc}^{-1} \right] + i u_s^+ C^+ + \tau^+ C^+ \frac{d \left[\overline{u_y^2}^+ \left(\frac{\tau_L}{\tau_L + \tau_p} \right) \right]}{dy^+}, \quad (8.5)$$

В квазистационарном режиме можно считать поток j и скорость осаждения u_d^+ постоянными и рассматривать (8.5) как дифференциальное уравнение для определения концентраций C^+ . Поскольку граничные условия ставятся на обоих концах промежутка: $C^+ = 0$ при $y^+ = 0$ и $C^+ = 1$ при $y^+ = \infty$, то для выполнения второго граничного условия необходимо выбрать самосогласованное значение скорости осаждения u_d^+ , которое и является решением задачи. Реально граничные условия

ставятся в (Zhao and Wu, 2006a) при $y^+ = r^+$ (здесь $r^+ = ru^*/\nu$ — безразмерный радиус частицы) и при $y^+ = 30$ (это фактическая толщина пограничного слоя):

$$C^+ = 0 \quad \text{при} \quad y^+ = r^+ \quad \text{и} \quad C^+ = 1 \quad \text{при} \quad y^+ = 30, \quad (8.6)$$

лагранжес временной масштаб τ_L и флуктуации скорости среды параметризуются в пограничном слое следующим образом:

$$\tau_L = \frac{\nu_t}{u_y'^2}; \quad \overline{u_y'^2}^+ = \left(\frac{0,005y^{+2}}{1 + 0,002923y^{+2,128}} \right)^2. \quad (8.7)$$

Для полного определения всех величин, входящих в уравнение (8.5), приведем параметрические зависимости для турбулентной вязкости в пограничном слое:

$$\begin{aligned} \nu_t^+ &= 7,669 \cdot 10^{-4}(y^+)^3 \quad \text{при} \quad 0 \leq y^+ \leq 4,3, \\ \nu_t^+ &= 10^{-3}(y^+)^{2,8214} \quad \text{при} \quad 4,3 \leq y^+ \leq 12,5, \\ \nu_t^+ &= 1,07 \cdot 10^{-2}(y^+)^{1,8895} \quad \text{при} \quad 12,5 \leq y^+ \leq 30. \end{aligned} \quad (8.8)$$

Анализ решения и вывод аппроксимационных формул. Выпишем общее решение уравнения (8.5), считая скорость осаждения u_d^+ постоянной (далее везде будем использовать y без значка «+», зависимость от τ^+ или диаметра частиц d везде подразумевается):

$$\begin{aligned} C^+(y) &= \frac{u_d^+}{p(a, y)} \int_a^y \frac{p(a, z) dz}{F(z)}; \quad p(a, y) = \exp \left(\int_a^y \frac{G(z)}{F(z)} dz \right), \\ F(y) &= \text{Sc}^{-1} + \nu_t^+(y) \left(\frac{\tau_L}{\tau_L + \tau_p} \right), \\ G(y) &= \tau^+ \frac{d}{dy} \left[\overline{u_y'^2}^+ \left(\frac{\tau_L}{\tau_L + \tau_p} \right) \right] + iu_g^+, \end{aligned} \quad (8.9)$$

где константы a и u_d^+ должны выбираться из условий на краях пограничного слоя. В результате в (Zhao and Wu, 2006a) получено следующее выражение для скорости осаждения:

$$u_d^+ = \frac{p(r^+, 30)}{\int_{r^+}^{30} \frac{p(r^+, y) dy}{F(y)}} = \frac{1}{\int_{r^+}^{30} \frac{P(y) dy}{F(y)}}; \quad P(y) = \exp \left(- \int_y^{30} \frac{G(z)}{F(z)} dz \right). \quad (8.10)$$

Проведенные нами численные расчеты показали, что прямое интегрирование дифференциального уравнения (8.5), составляющего

основу модели (Zhao and Wu, 2006a, Zhao and Wu, 2006b), либо его формального решения (8.10) занимает слишком много машинного времени из-за сильного изменения шага интегрирования на разных участках пограничного слоя. Это сильно затрудняет использование (8.5), (8.10) в рамках численных 2D-, 3D-комплексов, поскольку к расчету осаждения необходимо обращаться на каждом шаге по пространству и по времени.

Аналитическое и численное исследование показывает, что подынтегральная функция $H(y) = \frac{1}{F(y)} \exp \left[- \int_y^{30} \frac{G(z) dz}{F(z)} \right]$ в знаменателе (8.10) фактически имеет особенность при $y \rightarrow 0$. В целом, на отрезке $0 \leq y \leq 30$, отвечающем всему пограничному слою, основные вклады в интеграл $J(r^+) = (u_d^+)^{-1} = \int_{r^+}^{30} H(y) dy$ дает либо нижний, либо верхний пределы интегрирования. Функция $H(y)$ имеет при этом резкие максимумы на соответствующих концах отрезка $0 \leq y \leq 30$. В соответствии с таким поведением $H(y)$, распишем полный интеграл J как сумму вкладов от нижнего J_1 и верхнего J_2 пределов: $J(r^+) = \int_{r^+}^{30} H(y) dy = J_1(r^+) + J_2$, и оценим эти слагаемые по отдельности.

Обратимся к вкладу от нижнего предела J_1 . Сингулярность подынтегрального выражения определяется членом $1/F(y)$. В функции $G(y)$ удобно выделить вклад турбофореза и седиментации по отдельности:

$$\frac{1}{F(y)} \exp \left[- \int_y^{30} \frac{G(z) dz}{F(z)} \right] \approx \frac{\exp [-K(\tau^+)]}{F(y)} \exp \left[- i u_g^+ \int_y^{30} \frac{dz}{F(z)} \right],$$

где введено обозначение

$$K(\tau^+) = \tau^+ \int_0^{30} \frac{d}{dy} \left[\overline{u_y'^2}^+ \left(\frac{\tau_L}{\tau_L + \tau_p} \right) \right] \frac{dy}{F(y)}.$$

Следовательно

$$\begin{aligned} J_1(r^+) &\approx \exp [-K(\tau^+)] \int_{r^+}^{30} \frac{dy}{F(y)} \exp \left[- i u_g^+ \int_y^{30} \frac{dz}{F(z)} \right] = \\ &= \frac{\exp [-K(\tau^+)]}{i u_g^+} \left\{ 1 - \exp \left[- i u_g^+ \int_{r^+}^{30} \frac{dz}{F(z)} \right] \right\}, \end{aligned}$$

$$J_1(r^+) \approx \exp[-K(\tau^+)] \int_{r^+}^{30} \frac{dy}{F(y)} \quad \text{при } i = 0.$$

В этих формулах $\exp[-K(\tau^+)]$ усредненно учитывает вклад турбофореза.

Расчеты показали, что в практически важных диапазонах изменения Sc и τ^+ хорошо работает следующая аппроксимация: $K(\tau^+) = 1,2\tau^+$. Окончательно для вклада от нижнего предела имеем:

$$J_1(r^+, \tau^+, Sc) = \frac{\exp(-1,2\tau^+)}{iu_s^+(\tau^+)} \{1 - \exp[-iu_s^+(\tau^+)I_{L-N}(r^+, Sc)]\}, \quad i \neq 0,$$

$$J_1(r^+, \tau^+, Sc) = \exp(-1,2\tau^+)I_{L-N}(r^+, Sc), \quad i = 0. \quad (8.11)$$

Для интеграла $I_{L-N}(r^+, Sc) = \int_{r^+}^{30} \frac{dy}{F(y)}$ аналитическая формула получена в статье (Lai and Nazaroff, 2000), где рассмотрено осаждение мелких частиц без учета турбофореза:

$$I_{L-N}(r^+, Sc) = [3,64(Sc)^{2/3}(a-b) + 39],$$

$$a = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{(10,92Sc^{-1/3} + 4,3)^3}{Sc^{-1} + 0,0609} \right] + \sqrt{3} \operatorname{tg}^{-1} \left[\frac{8,6 - 10,92Sc^{-1/3}}{10,92 \cdot \sqrt{3} \cdot Sc^{-1/3}} \right],$$

$$b = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{(10,92Sc^{-1/3} + r^+)^3}{Sc^{-1} + 7,669 \cdot 10^{-4}(r^+)^3} \right] + \sqrt{3} \operatorname{tg}^{-1} \left[\frac{2r^+ - 10,92Sc^{-1/3}}{10,92 \cdot \sqrt{3} \cdot Sc^{-1/3}} \right]. \quad (8.12)$$

На этом оценка вклада J_1 от нижнего предела полностью закончена. По своему смыслу этот вклад описывает процесс осаждения мелких частиц, для которых основным процессом является броуновская диффузия, а влияние турбофореза приводит к небольшой поправке $\exp[-K(\tau^+)]$. Из формулы (8.12) можно получить простую оценку для скоростей осаждения мелких частиц в диапазоне размеров $0,005 \text{ мкм} \ll d \ll 1 \text{ мкм}$. Для этого диапазона выполняются неравенства $1 \ll Sc \ll (r^+)^{-3}$, позволяющие существенно упростить выражение для интеграла $I_{L-N}(r^+, Sc)$:

$$(a-b) = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} = 3,628; \quad I_{L-N} \approx 13,204 \cdot Sc^{2/3}.$$

Исходя из этого, скорость осаждения мелких аэрозолей можно аппроксимировать выражением $u_d \approx 0,0757 \cdot u^* Sc^{-2/3}$. Реально это выражение работает в диапазоне размеров $0,005 \text{ мкм} \ll d \ll 1 \text{ мкм}$ для

вертикальных стенок и в диапазоне $0,005 \text{ мкм} \ll d \ll 0,5 \text{ мкм}$ — для горизонтальных. Отметим также, что аналитическая оценка интеграла J_1 позволяет согласовать модели (Lai and Nazaroff, 2000) и (Zhao and Wu, 2006a) между собой.

Для оценки вклада J_2 от верхнего предела сделаем приближенную замену, которая справедлива для функции H , имеющей максимум на верхней границе $y = 30$:

$$H(y) = \frac{1}{F(y)} \exp \left[- \int_y^{30} \frac{G(z) dz}{F(z)} \right] \approx \frac{1}{F(30)} \exp \left[- \frac{G(30)}{F(30)} \int_y^{30} dz \right].$$

Следовательно

$$J_2 \approx \int_0^{30} \frac{dy}{F(30)} \exp \left[- \frac{G(30)}{F(30)} (30 - y) \right] = \frac{1 - \exp \left[- 30 \cdot G(30)/F(30) \right]}{G(30)}.$$

Используя параметризацию пограничного слоя, получим следующую формулу для функций G и F на верхнем пределе и для вклада J_2 :

$$J_2(\tau^+, \text{Sc}) = \frac{1 - \exp \left\{ - \gamma(\tau^+, \text{Sc}) \left[1 + \frac{i u_g^+(\tau^+)}{p(\tau^+)} \right] \right\}}{[p(\tau^+) + i u_g^+(\tau^+)]}. \quad (8.13)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \gamma(\tau^+, \text{Sc}) &= \frac{0,4611 \cdot \text{Sc} \cdot \tau^+ (1 + 0,3859 \cdot \tau^+)}{(1 + 0,1193 \cdot \tau^+)(1 + 0,1193 \cdot \tau^+ + 6,613 \cdot \text{Sc})}, \\ p(\tau^+) &= \frac{\tau^+ (1 + 0,3859 \cdot \tau^+)}{65,06 \cdot (1 + 0,1193 \cdot \tau^+)^2}. \end{aligned} \quad (8.14)$$

Физический смысл формулы (8.13) в том, что она дает оценку для вклада турбофореза.

Итак, окончательная формула для безразмерной скорости осаждения на гладкую поверхность, основанная на модели работы (Zhao and Wu, 2006a) и на анализе особенностей общего решения (8.10), имеет вид

$$u_d^+ = \frac{1}{J_1(r^+, \tau^+, \text{Sc}) + J_2(\tau^+, \text{Sc})},$$

где $J_1(r^+, \tau^+, \text{Sc})$ определяется по формулам (8.11), (8.12), а $J_2(\tau^+, \text{Sc})$ — по формулам (8.13), (8.14). В размерном виде:

$$u_d = \frac{u^*}{J_1(r^+, \tau^+, \text{Sc}) + J_2(\tau^+, \text{Sc})}. \quad (8.15)$$

Проверка точности аппроксимации. Обратимся к физическому смыслу полученной нами аппроксимации (8.15). Расчеты показывают, что в диапазоне размеров $d = 10\text{--}100$ мкм происходит резкая смена поведения подинтегральной функции $H(y)$: сначала основной вклад в осаждение вносит прилегающий к стенке пограничный слой $y \approx 0$, а затем — его внешняя граница $y \approx 30$. Примечательно, что смена режимов происходит при $\tau^+ \approx 1$, и это очень важный критерий для смены режимов осаждения. Для определенности рассмотрим случай осаждения на вертикальную стенку ($i = 0$). Для значений $\tau^+ \ll 1$ ведущим механизмом осаждения является броуновская диффузия, при этом турбофорезом можно пренебречь и (8.15) переходит в формулу, полученную в работе (Lai and Nazaroff, 2000):

$$u_d^+ \approx [J_1(r^+, \tau^+, Sc)]^{-1} = [I_{L-N}(r^+, Sc)]^{-1}.$$

Для крупных частиц с $\tau^+ \gg 1$ ведущим механизмом осаждения является турбофорез и полученная нами явная формула для его вклада следующая:

$$u_d^+ \approx [J_2(\tau^+, Sc)]^{-1} = \frac{p(\tau^+)}{1 - \exp[-\alpha(\tau^+, Sc)]}. \quad (8.16)$$

В промежуточной области $1 < \tau^+ < 100$ вклады J_1 и J_2 могут быть сравнимы, и аппроксимация (8.15) может иметь пониженную точность при этих значениях d .

В первую очередь следует проверить точность полученной нами аппроксимационной формулы (8.15), которая призвана заменить трудоемкое для численных расчетов решение (8.10). В проверочных расчетах фиксировались значения плотности частиц $\rho_p = 1500 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$ и скорости трения $u^* = 0,341 \text{ м/с}$, параметры воздуха брались при нормальных условиях: температура $T = 290 \text{ К}$, плотность $\rho = 1,23 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$. Данные условия соответствуют параметрам, при которых проводились экспериментальные исследования с частицами уранина (uranine particle) в работе (Sehmel, 1973). Далее в диапазоне размеров $d = 10^{-2}\text{--}10^2$ мкм определялись скорости осаждения по формуле (8.15) и результаты сравнивались с численным расчетом интеграла (8.10) для ряда значений d .

Осаждение на вертикальные стенки ($i = 0$). Результаты расчетов представлены на рис. 8.1. Расчеты по аппроксимационной формуле (8.15) показаны сплошной линией, численные расчеты интеграла (8.10) — маркерами (кружками). Скорость осаждения $u_d = u_d^+ \cdot u^*$ приведена на рисунке в размерных единицах м/с.

Совпадение следует признать очень хорошим.

Осаждение на горизонтальную подстилающую поверхность (пол, $i = 1$). Результаты расчетов представлены на рис. 8.2. Хорошее

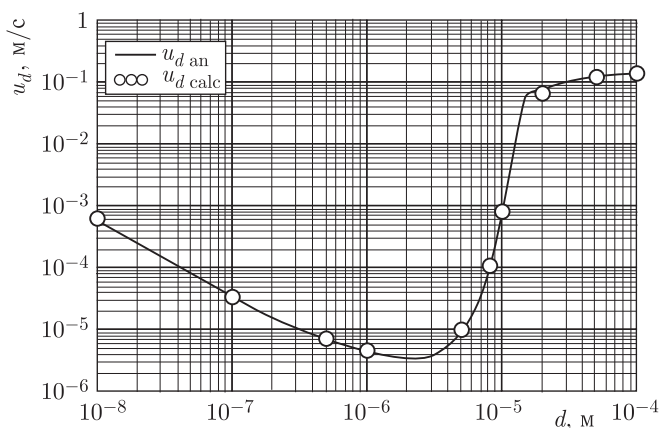


Рис. 8.1. Осаждение на гладкие вертикальные стенки ($i = 0$). Сравнение значений $u_{d \text{ an}}$, полученных по аппроксимационной аналитической формуле (8.15), с численным расчетом интеграла (8.10) $u_{d \text{ calc}}$

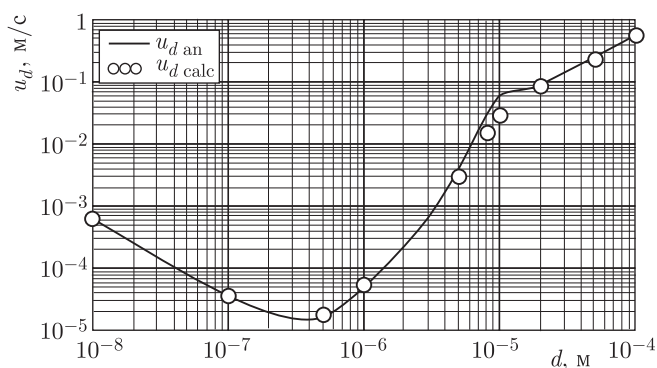


Рис. 8.2. Осаждение на гладкую горизонтальную поверхность ($i = 1$). Сравнение значений $u_{d \text{ an}}$, полученных по аппроксимационной аналитической формуле (8.15), с численным расчетом интеграла (8.10) $u_{d \text{ calc}}$

совпадение имеет место для всех размеров частиц, исключая область $d = 6\text{--}15 \text{ мкм}$ ($1 < \tau^+ < 10$). В точке $d = 10 \text{ мкм}$ различие составляет около двух раз. Причина этого обсуждалась выше. Найти более удачную аппроксимацию и устранить эту разницу не удастся, к тому же она меньше экспериментального разброса (см. далее). Отметим также, что диапазон $d = 6\text{--}15 \text{ мкм}$ очень узкий, к тому же аппроксимация (8.15) завышает точные значения, т. е. служит консервативной оценкой.

Следует отметить, что скорость осаждения в случае, рассмотренном на рис. 8.2, всегда больше скорости для случая рис. 8.1, как это и должно быть по физическому смыслу. Например, для частицы диаметром 20 мкм расчет по формуле (8.15) дает значения скоростей осаждения

9,02 см/с и 7,42 см/с соответственно. Разница между ними примерно равна скорости седиментации.

Осаждение на потолок ($i = -1$). Результаты расчетов представлены на рис. 8.3.

В расчетах скорости осаждения на потолок для значений диаметра частиц $d > 5$ мкм ($\tau^+ > 1$) обе формулы дают аварийный останов (break). Причиной этого служит расходимость интеграла в выражении для $P(y) = \exp\left(-\int_y^{30} \frac{G(z)}{F(z)} dz\right)$. Из рис. 8.3 видно, что для частиц с диаметром больше 1 мкм скорость осаждения пренебрежимо мала, поэтому в практических расчетах можно полагать ее равной нулю при $\tau^+ > 1$.

Область применения полученных выше формул ограничивается шероховатостями z_0 , размер которых меньше толщины первой зоны пограничного слоя (в безразмерных единицах это $y^+ = 4,3$). Это приводит к ограничению $z_0 \leq 4,3\nu/u^*$. Для нормальных условий в атмосфере и для скорости трения $u^* \approx 0,6$ м/с это шероховатости $z_0 \approx 100$ мкм. Для расчетов с малой шероховатостью (например, в системах вентиляции, в специальных экспериментах, на местности с гладкой подстилающей поверхностью — снег, вода) рекомендуется пользоваться описанными выше моделями. Кроме того, они важны для согласования эмпирических моделей с поведением, которое требуется по физическому смыслу процессов осаждения. Например, в области малых размеров

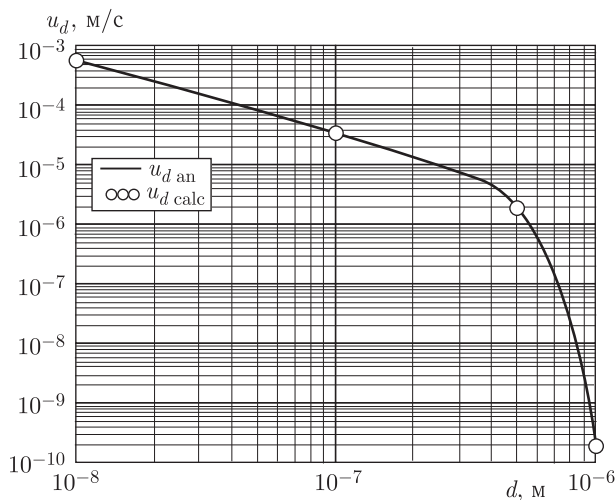


Рис. 8.3. Осаждение на гладкий потолок ($i = -1$). Сравнение значений $u_{d\text{ an}}$, полученных по аппроксимационной аналитической формуле (8.15), с численным расчетом интеграла (8.10) $u_{d\text{ calc}}$

частиц должна вести броуновская диффузия, для которой хорошей аппроксимацией служит член $0,0757 \cdot u_*^* Sc^{-2/3}$. Следует подчеркнуть, что в данном случае речь идет о геометрической шероховатости, обусловленной высотой неровности поверхности.

Для переноса в условиях реальной местности с наличием посевов, кустарника, застройки, где достигаются значения $z_0 = 10^{-2} - 1$ м, требуется совершенно иной класс моделей, — в основном эмпирического характера — о которых речь пойдет ниже. В этом случае меняется и сам смысл шероховатости — это величина, которая характеризует логарифмический профиль скорости течения.

8.3. Полуэмпирическая модель Земела для осаждения на шероховатые поверхности

Осаждение на горизонтальную поверхность. В этом разделе мы будем опираться на полуэмпирическую модель определения скорости сухого осаждения на горизонтальную подстилающую поверхность (Sehmel, 1973; Sehmel and Hodgson, 1978; Sehmel, 1980; Kharchenko, 1997), которую обычно называют моделью Земела, и экспериментальные данные работы (Slinn, 1978).

Эксперименты показывают, что вертикальный поток примеси вблизи подстилающей поверхности j пропорционален ее приземной концентрации $n(z)$. Обычно скорость сухого осаждения $\alpha(z) = j/n(z)$ определяют по измеренным концентрациям и потоку примеси на некоторой высоте z_{exp} порядка 0,1–1 м над подстилающей поверхностью.

Если предположить, что на основе экспериментальных данных построена функция для определения скорости сухого осаждения на высоте z_{exp} над поверхностью, то дальше легко строится модель, прогнозирующая скорость осаждения на любой высоте приземного слоя $z > z_{\text{exp}}$. Представим скорость осаждения α_z на высоте z над поверхностью в виде

$$\alpha_z = \frac{-j}{n_z} = \frac{u_g}{1 - \exp\left(\frac{u_g}{u_*} \text{Int}\right)}.$$

Как и в работе (Sehmel and Hodgson, 1978), введено обозначение

$$\text{Int} = \int_z^0 \frac{u_* dz}{K_3 + D} = \text{Int}_{\text{exp}} + \int_z^{z_{\text{exp}}} \frac{u_* dz}{K_3 + D} = \text{Int}_{\text{exp}} + \text{Int}_z,$$

где z_{exp} — высота, на которой проведены измерения скорости сухого осаждения. Так называемый интеграл сопротивления Int разбивается на две составляющие: Int_{exp} выражается через экспериментальные значения скорости сухого осаждения,

$$\text{Int}_{\text{exp}} = \frac{u_*}{u_g} \ln \left(1 - \frac{u_g}{\alpha_{\text{exp}}} \right),$$

а второй интеграл — Int_z — берется аналитически для всех категорий устойчивости атмосферы (Kharchenko, 1997):

$$\text{Int}_z = \begin{cases} \frac{-1}{k} \ln \frac{z}{z_{\text{exp}}}, & |L| = \infty; \quad -\frac{1}{k} \left(\ln \frac{z}{z_{\text{exp}}} + 6 \frac{z - z_{\text{exp}}}{L} \right), & L > 0, \\ -\frac{1}{k} \ln \frac{\left(\sqrt{1 - \frac{9}{L} z} - 1 \right) \left(\sqrt{1 - \frac{9}{L} z_{\text{exp}}} + 1 \right)}{\left(\sqrt{1 - \frac{9}{L} z} + 1 \right) \left(\sqrt{1 - \frac{9}{L} z_{\text{exp}}} - 1 \right)}, & L < 0, \end{cases} \quad (8.17)$$

В формуле (8.17) L — масштаб Монина–Обухова.

В работе (Sehmel and Hodgson, 1978) было предложено интерполяционное выражение для определения Int_{exp} на основе экспериментальных скоростей осаждения на высоте $z_{\text{exp}} = 0,01$ м. Однако, оказалось, что эта аппроксимация не описывает экспериментальные результаты и графические данные, представленные в работах (Sehmel, 1973; Sehmel and Hodgson, 1978; Slinn, 1978). По-видимому, соответствующие уравнения приведены в работе (Sehmel and Hodgson, 1978) с опечатками. Используя экспериментальный материал, представленный в указанных выше работах (в основном в графическом виде), в (Kharchenko, 1997) получено следующее интерполяционное выражение для скорости сухого осаждения, справедливое для шероховатостей $z_0 \leq 10$ см:

$$\begin{aligned} \ln(-\text{Int}_{\text{exp}}) = & -367,8 + 16,4 \ln \left(\frac{\nu}{D} \right) - 0,73 \ln(100d) \ln(10^4 D) - \\ & - 0,5 [\ln(100d)]^2 + 0,13 \ln \left(\frac{0,03}{z_0} \right) + 0,25 \ln \left(\frac{0,2}{u_*} \right) \left[1 - 0,2 \ln \left(\frac{0,03}{z_0} \right) \right] - \\ & - 0,03 \ln \tau_+ \ln \left(\frac{0,03}{z_0} \right) - 32,7 \ln(100d), \quad (8.18) \end{aligned}$$

$$\alpha_z = \frac{u_g}{1 - \exp \left[\frac{u_g}{u_*} (\text{Int}_{\text{exp}} + \text{Int}_z) \right]}.$$

В выражении (8.18) τ_+ — безразмерное время релаксации частицы; все величины приведены в единицах СИ. Проверим работоспособность и точность аппроксимации (8.18).

Для иллюстрации приведем результаты расчетов, в которых находилась скорость осаждения частиц плотностью $\rho_p = 1500 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$ на высоте 0,01 м. Расчеты проводились для следующих условий: нормальное атмосферное давление, температура воздуха 290 К. При таких условиях плотность воздуха $\rho = 1,22 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$, динамическая вязкость $\mu = 1,8 \cdot 10^{-5} \text{ Н} \cdot \text{с} / \text{м}^2$. На рисунках 8.4–8.6 приведено сравнение рас-

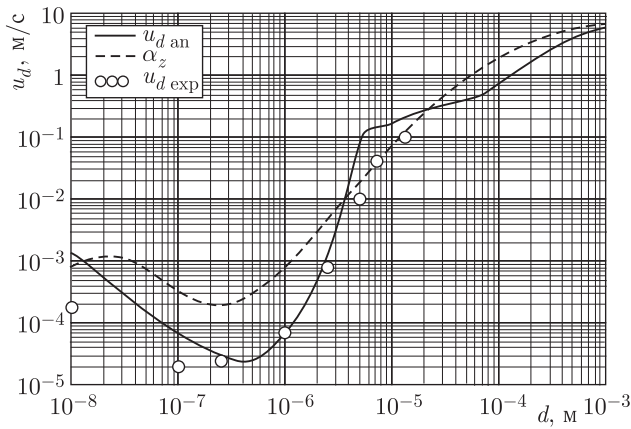


Рис. 8.4. Сравнение экспериментальных скоростей сухого осаждения на горизонтальную поверхность $u_{d \text{ exp}}$, приведенных в работе (Sehmel, 1973), с расчетами $u_{d \text{ an}}$ и α_z по аппроксимационным формулам (8.15) и (8.18) для значений $z = 0,01 \text{ м}$, $u^* = 0,726 \text{ м/с}$, $z_0 = 4 \cdot 10^{-5} \text{ м}$

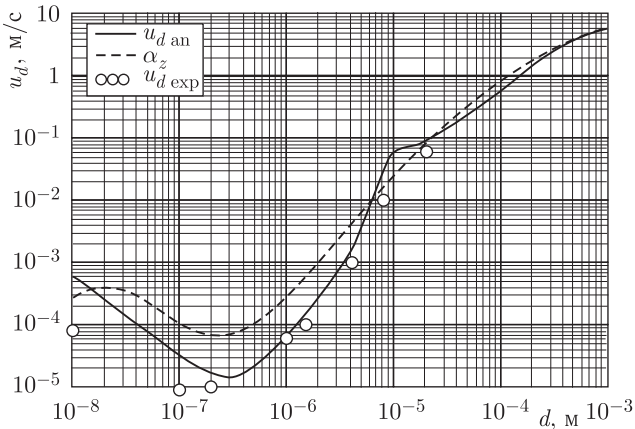


Рис. 8.5. Сравнение экспериментальных скоростей сухого осаждения на горизонтальную поверхность $u_{d \text{ exp}}$, приведенных в работе (Sehmel, 1973), с расчетами $u_{d \text{ an}}$ и α_z по аппроксимационным формулам (8.15) и (8.18) для значений $z = 0,01 \text{ м}$, $u^* = 0,341 \text{ м/с}$, $z_0 = 4 \cdot 10^{-5} \text{ м}$

четов с результатами работы (Sehmel, 1973) для небольшого параметра шероховатости $z_0 = 40 \text{ мкм}$. Нанесены следующие величины: сплошная линия — результаты расчетов по формуле (8.15), пунктирная линия — расчеты по формуле (8.18), кружки — экспериментальные данные, которые представлены в работе (Sehmel, 1973) в виде графиков. Все

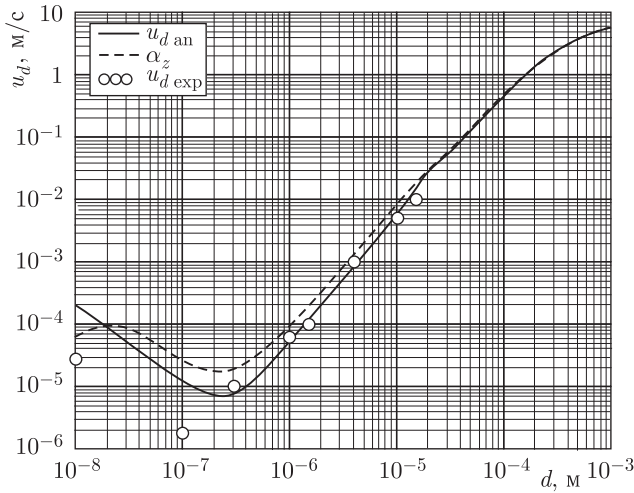


Рис. 8.6. Сравнение экспериментальных скоростей сухого осаждения на горизонтальную поверхность $u_{d \text{ exp}}$, приведенных в работе (Sehmel, 1973), с расчетами $u_{d \text{ an}}$ и α_z по аппроксимационным формулам (8.15) и (8.18) для значений $z = 0,01 \text{ м}$, $u^* = 0,114 \text{ м/с}$, $z_0 = 4 \cdot 10^{-5} \text{ м}$

величины приведены в СИ (скорость осаждения дана в м/с, диаметры частиц — в м).

Из рис.8.4–8.6 видно, что для данного параметра шероховатости скорости осаждения хорошо описываются формулой (8.15) для гладкой поверхности (сплошная линия). В точках $d = 0,01 \text{ мкм}$ и $d = 0,1 \text{ мкм}$ данные работы (Sehmel, 1973) вряд ли следует считать представительными, поскольку в них скорость осаждения меньше физического предела для броуновской диффузии, описываемого аппроксимацией $0,0757 \cdot u^* \text{Sc}^{-2/3}$. Отметим также, что аппроксимация (8.18) дает в окрестности точки $d = 0,01 \text{ мкм}$ нефизический изгиб, но частицы с размерами $d < 0,01 \text{ мкм}$ здесь не рассматриваются.

На рисунках 8.7, 8.8 приведено сравнение с экспериментальными данными работы (Slinn, 1978), измеренными для больших шероховатостей: $z_0 = 0,47 \text{ мм}$ и $z_0 = 0,7 \text{ мм}$. Нанесены следующие величины: сплошная линия — результаты расчетов по формуле (8.18), пунктирная линия — расчеты по формуле (8.15), кружки — графические данные, приведенные в работе (Slinn, 1978).

Видно, что для данных параметров шероховатости начинает лучше работать формула (8.18), а по совокупности результатов, представленных на рис.8.4–8.8, можно отметить взаимную согласованность теоретического (8.15) и полуэмпирического (8.18) подходов.

Следует отметить, что экспериментальные данные, приведенные в работе (Slinn, 1978), испытывают значительный разброс. Так, например, эксперименты, результаты которых приведены на рис.8.7, 8.8,

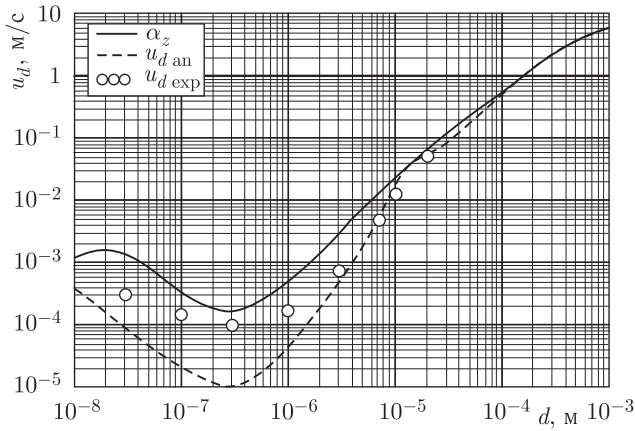


Рис. 8.7. Сравнение экспериментальных скоростей сухого осаждения на шероховатую горизонтальную поверхность $u_{d \text{ exp}}$, приведенных в работе (Slinn, 1978), с расчетами $u_{d \text{ an}}$ и α_z по аппроксимационным формулам (8.15) и (8.18) для значений $u^* = 0,22$ м/с, $z_0 = 4,7 \cdot 10^{-3}$ м

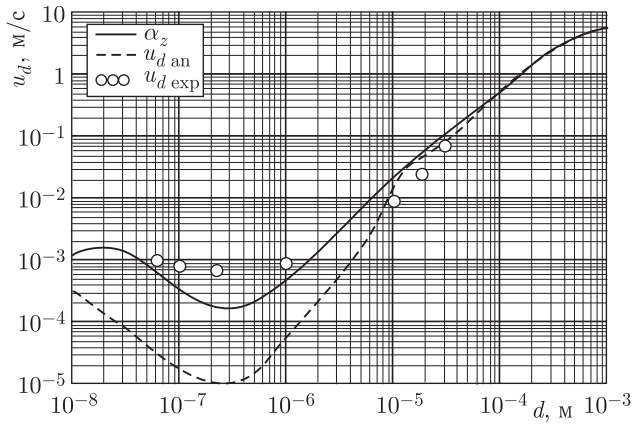


Рис. 8.8. Сравнение экспериментальных скоростей сухого осаждения на шероховатую горизонтальную поверхность $u_{d \text{ exp}}$, приведенных в работе (Slinn, 1978), с расчетами $u_{d \text{ an}}$ и α_z по аппроксимационным формулам (8.15) и (8.18) для значений $u^* = 0,19$ м/с, $z_0 = 7 \cdot 10^{-3}$ м

проводились практически в одних и тех же условиях, а скорости осаждения в диапазоне размеров $d = 0,1-1$ мкм отличаются примерно на порядок.

В целом по результатам сравнения рассчитанных по (8.17) и (8.18) скоростей сухого осаждения с данными из работы (Sehmel and Hodgson, 1978) нами не обнаружено завышений более, чем на порядок, что соответствует разбросу экспериментальных данных. Это обстоя-

тельство позволяет рекомендовать модель (8.17), (8.18) для прогноза скоростей сухого осаждения при значениях параметра шероховатости $z_0 \geq 4,3\nu/u^*$.

Модели осаждения на вертикальные стенки. Для гладких вертикальных стенок теоретическая модель, представленная в разд. 8.2, дает исчерпывающий ответ, как по полноте учета важных физических процессов, так и по наличию рабочих формул, удобных для проведения массовых расчетов. Как показано в разд. 8.2, формула (8.15) с явными выражениями (8.11), (8.13) для вкладов J_1 и J_2 дает практически точный ответ при $i = 0$. Отметим, что формулу для осаждения на вертикальные стенки легко получить предельным переходом $u_s \rightarrow 0$ из формул для осаждения на горизонтальную поверхность.

Экспериментальные данные по скоростям осаждения (Davies, 1966; Liu and Agarwal, 1974; Wood, 1981a; Johansen, 1991; Fan and Ahmadi, 1993; Sippola and Nazaroff, 2002) ограничиваются, в основном, измерениями в трубках небольшого диаметра, в трактах физических установок, в вентиляционных системах. Как правило, эти измерения проводятся лишь для небольших значений параметра шероховатости — до сотен микрометров. В то же время, для расчетов переноса примесей в условиях городской застройки требуются скорости осаждения для шероховатостей до нескольких сантиметров, которые получаются при усреднении рельефа стенок (наличие оконных проемов, учет рельефа кладки и пр.) в пределах масштаба сетки. Из-за отсутствия опытных данных в этой области необходимо будет пользоваться сшивкой с результатами для гладких стенок, экстраполяцией результатов с учетом физических соображений и выполнением асимптотик в области больших и малых размеров частиц.

Одной из наиболее цитируемых моделей осаждения на вертикальные стенки с учетом шероховатости является полуэмпирическая модель работы (Fan and Ahmadi, 1993), основанная на экспериментальных данных, в которой безразмерная скорость осаждения u_d^+ рассчитывается по формулам

$$\begin{aligned} F_1 &= (1 + \tau^{+2} L_1^+)^{-1}; \quad F_2 = 92,166 \tau^{+2} g^+ L_1^+ F_1; \\ F_3 &= 0,037 \left[1 - \frac{\tau^{+2} L_1^+ 1 + g^+}{0,037} \right]^{-1}; \quad L_1^+ = \frac{3,08}{d^+ S}, \\ u_d^+ &= 0,084 \text{Sc}^{-2/3} + \frac{1}{2} \left[\frac{(0,064 k^+ + d^+/2) + F_2}{3,42 + F_2} \right]^{F_1} [1 + 8 e^{-(\tau^+ - 10)^{2/32}}] F_3, \\ \text{если } u_d^+ &< 0,14; \quad u_d^+ = 0,14, \quad \text{если } u_d^+ > 0,14; \\ u_d^+ &= 0,14, \quad \text{если } u_d^+ < 0, \end{aligned} \tag{8.19}$$

где k^+ — шероховатость в безразмерных единицах; S — отношение плотностей частицы и среды. В этой модели скорость осаждения

(крупных частиц) не превышает величину $0,14u^*$. Для малых размеров частиц соблюдается физически правильная асимптотика $u_d^+ \sim Sc^{-2/3}$.

На рисунках 8.9, 8.10 приведено сравнение результатов расчетов по модели разд. 8.2 для гладкой стенки (см. формулу (8.15)) с расчетами по формуле (8.19) для скорости трения $u_* = 0,341$ м/с и шероховатостей $z_0 = 40$ мкм и $z_0 = 200$ мкм. Пунктирная линия — результаты расчетов по формуле (8.19), сплошная линия — расчеты по формуле (8.15). Видно, что даже для небольшой шероховатости $z_0 = 40$ мкм

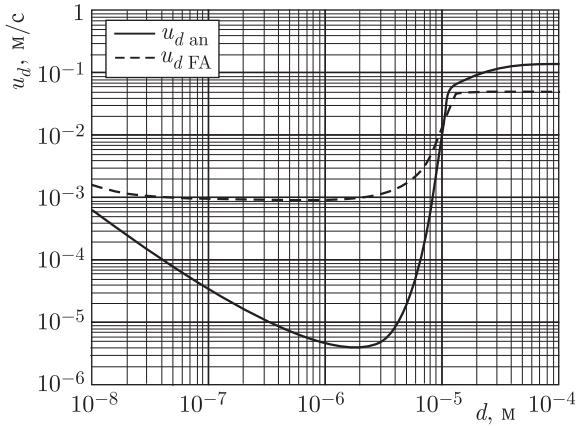


Рис. 8.9. Сравнение результатов расчетов скорости осаждения на вертикальные стенки: $u_{d\text{ an}}$ — расчеты по формуле (8.15), $u_{d\text{ FA}}$ — по формуле (8.19) для $u^* = 0,341$ м/с и шероховатости $z_0 = 4 \cdot 10^{-5}$ м

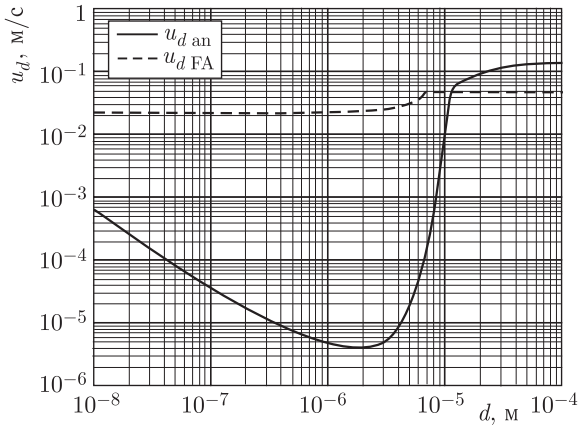


Рис. 8.10. Сравнение результатов расчетов скорости осаждения на шероховатые вертикальные стенки: $u_{d\text{ an}}$ — расчеты по формуле (8.15), $u_{d\text{ FA}}$ — по формуле (8.19) для $u^* = 0,341$ м/с и шероховатости $z_0 = 2 \cdot 10^{-4}$ м

расчеты по формуле (8.19) сильно превышают скорости осаждения для гладкой стенки, найденные по формуле (8.15). В дополнение к этому, скорости, найденные по формуле (8.19) для шероховатости $z_0 = 200$ мкм, вообще практически не меняются во всем диапазоне размеров частиц $d = 0,01-100$ мкм, т. е. результат применения этой модели мало содержателен. В целом, данные по модели (8.19) не согласуются с экспериментальными результатами работы (Sehmel, 1973). По этой причине в дальнейшем модель (8.19) рассматриваться не будет.

Таким образом, возникает необходимость в разработке новой модели, которая была бы применима для умеренных шероховатостей $z_0 \approx 1$ см. Для этого мы воспользуемся теоретическими соображениями и преимственностью с моделью Земела для горизонтальных поверхностей. Как уже упоминалось, в теоретической модели, проанализированной в разд. 8.2, скорости осаждения для вертикальных стенок получаются предельным переходом $u_s \rightarrow 0$ из формул для осаждения на горизонтальную поверхность. В основе этого перехода лежит тот факт, что погранслои в обоих случаях описывается одинаково, а влияние седиментации учитывается явно с помощью дополнительного слагаемого в формуле (8.9) для функции $G(y)$. Воспользуемся таким же приемом для модифицированной полуэмпирической модели Земела (8.18), которая выбрана нами основной моделью по расчету осаждения на горизонтальную поверхность. Попутно заметим, что учитывать атмосферные профили здесь нет необходимости, кроме того, выполним подбор константы в формуле (8.18) так, чтобы поведение скоростей осаждения для больших размеров частиц соответствовало выражению (8.15) при $i = 0$. Это приводит к следующей рабочей формуле для вертикальных поверхностей:

$$\begin{aligned} \ln(-\text{Int}_{\text{exp}}) = & -365,5 + 16,4 \ln\left(\frac{\nu}{D}\right) - 0,73 \ln(100d) \ln(10^4 D) - \\ & - 0,5 [\ln(100d)]^2 + 0,13 \ln\left(\frac{0,03}{z_0}\right) + 0,25 \ln\left(\frac{0,2}{u_*}\right) \left[1 - 0,2 \ln\left(\frac{0,03}{z_0}\right)\right] - \\ & - 0,03 \ln \tau_+ \ln\left(\frac{0,03}{z_0}\right) - 32,7 \ln(100d), \quad \alpha = \frac{-u^*}{\text{Int}_{\text{exp}}}. \end{aligned} \quad (8.20)$$

На рисунках 8.11, 8.12 приведено сравнение результатов расчетов по формуле (8.20) с расчетами по формуле (8.15) при $i = 0$ и с экспериментальными данными работы (Sehmel, 1973), измеренными для небольшой шероховатости $z_0 = 40$ мкм. Нанесены следующие величины: сплошная линия — результаты расчетов по формуле (8.20), пунктирная линия — расчеты по формуле (8.15), кружки — графические данные, приведенные в работе (Sehmel, 1973). Следует отметить, что данные работы (Sehmel, 1973) при $d < 1$ мкм вряд ли представительны, поскольку они меньше физического предела для броуновской диффузии.

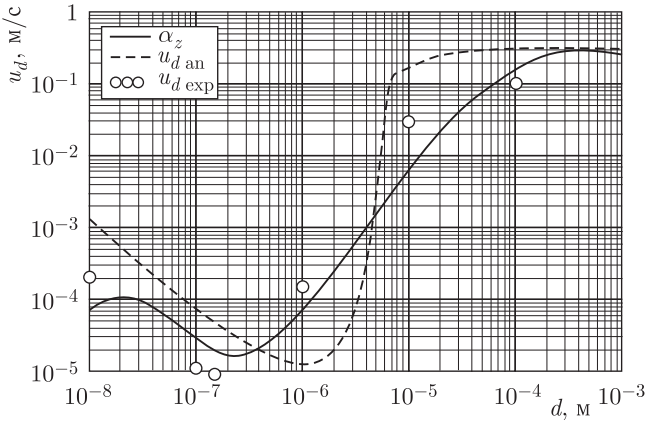


Рис. 8.11. Сравнение экспериментальных скоростей сухого осаждения на вертикальные стенки $u_{d \text{ exp}}$, приведенных в работе (Sehmel, 1973), с расчетами $u_{d \text{ an}}$ и α по аппроксимационным формулам (8.15) и (8.20) для значений $u^* = 0,726 \text{ м/с}$, $z_0 = 4 \cdot 10^{-5} \text{ м}$

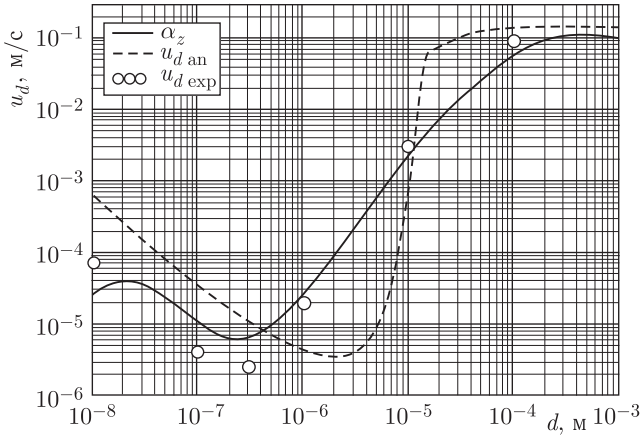


Рис. 8.12. Сравнение экспериментальных скоростей сухого осаждения на вертикальные стенки $u_{d \text{ exp}}$, приведенных в работе (Sehmel, 1973), с расчетами $u_{d \text{ an}}$ и α по аппроксимационным формулам (8.15) и (8.20) для значений $u^* = 0,341 \text{ м/с}$, $z_0 = 4 \cdot 10^{-5} \text{ м}$

По-видимому, в (Sehmel, 1973) они нанесены на графиках как грубая экстраполяция.

Обе формулы (8.15) и (8.20) дают качественное согласие с данными (Sehmel, 1973), но модель (8.20) для шероховатых вертикальных поверхностей работает лучше. Это не очень логичный результат, поскольку параметр шероховатости $z_0 = 40 \text{ мкм}$ удовлетворяет условию

$z_0 < 4,3\nu/u^*$. Однако, в целом совпадение неплохое и аппроксимацию (8.20) можно рекомендовать для использования в расчетах осаждения на вертикальные стенки.

В данной работе не затрагиваются процессы осаждения частиц на растительный покров. Это сложная и многофакторная проблема, требующая учета реальной геометрии поглощающей поверхности, а также воспроизведения сложной картины течений. Определенные успехи в решении этой проблемы продемонстрированы в работах (Petroff et al., 2008a; Petroff et al., 2008b), где выполнен обзор и анализ большого числа моделей и экспериментальных данных. Результаты этого анализа реализованы в новой модели, примеры применения которой содержатся в (Petroff et al., 2009).

8.4. Сводка результатов

В расчетах процессов осаждения аэрозолей в условиях городской застройки и внутри помещений рабочие формулы для скоростей сухого осаждения должны удовлетворять следующим требованиям:

- применимость для осаждения на вертикальные и горизонтальные поверхности;
- возможность расчета в широком диапазоне размеров частиц d и параметра шероховатости поверхности z_0 ;
- простота формул, дающая возможность расчетов в режиме реального времени.

Получение таких рабочих формул в широком диапазоне внешних условий требует сочетания теоретических и полуэмпирических подходов и процедуры согласования этих подходов между собой.

С учетом материалов известных обзоров (Slinn, 1978; Lai and Nazaroff, 2000; Sippola and Nazaroff, 2002; Nho-Kim, Michou and Peuch, 2004; Valentine and Smith, 2005; Зайчик, Алипченков, 2007; Jonsson, Karlsson and Jönsson, 2008), а также последних результатов в этой области, в качестве базовых подходов выбраны классические работы Земела с сотрудниками и теоретическая модель Zhao and Wu (2006a, 2006b), разработанная сравнительно недавно. В полуэмпирическом подходе можно отметить наличие экспериментального материала для различных внешних условий, в теоретическом — физическую обоснованность модели. Подходы перекрестно проверены, откорректированы и адаптированы к расчетам в виде простых, удобных формул. По совокупности результатов отмечается взаимная согласованность теоретического и полуэмпирического подходов.

В результате разработана процедура расчетов скоростей осаждения для гладких и шероховатых поверхностей, которая представлена в разд. 8.2 и 8.3 соответственно. Кратко она выглядит следующим образом (Piskunov, 2009):

1. Для скорости осаждения на гладкую поверхность (горизонтальную или вертикальную) используется рабочая формула (8.15), в кото-

рой J_1 определяется по формулам (8.11), (8.12), а J_2 — по формулам (8.13), (8.14).

2. Скорость осаждения на шероховатую поверхность с параметром $z_0 \geq 4,3\nu/u^*$ рассчитывается по формуле (8.18) для горизонтальной поверхности и по формуле (8.20) для вертикальной поверхности.

Результаты могут использоваться для расчетов осаждения аэрозолей на вертикальные и горизонтальные поверхности в условиях городской застройки и внутри помещений.

Аппроксимационные зависимости для выпадения аэрозолей на горизонтальную подстилающую поверхность широко используются в моделировании мезомасштабного переноса аэрозолей. В случаях, когда расчеты носят массовый характер, требуются достаточно простые аппроксимационные формулы. Например, в работах (Piskunov, Aloyan, Marchuk et al., 1997b; Пискунов, 2004) для скорости сухого осаждения u_d на местности нами использовалась следующая простая формула:

$$U_d(d) = u_g(d) + \alpha, \quad (8.21)$$

где $u_g(d)$ — скорость седиментации аэрозольной частицы диаметра d , а α — скорость осаждения невесомой примеси. Значение α заключено в пределах $\alpha = (10^{-4} - 10^{-2})$ м/с, в принципе оно должно зависеть от состава аэрозольной частицы (адгезии к поверхности) и скорости ветра в приземном слое (скорости трения u^*). Для иллюстрации на рис. 8.13 пунктирной линией приведены скорости осаждения, рассчитанные по (8.21) со значением $\alpha = 10^{-4}$ м/с. Экспериментальные данные (кружки) соответствуют рис. 8.7. Видно неплохое описание картины поведения $u_d(d)$ в среднем.

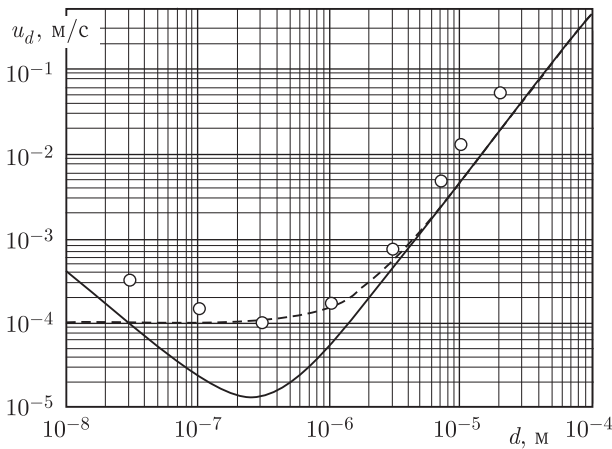


Рис. 8.13. Сравнение расчетов по формулам (8.21) (пунктирная линия) и (8.22) (сплошная линия) с экспериментальными данными работы (Slinn, 1978) для $u^* = 0,22$ м/с, $z_0 = 4,7 \cdot 10^{-3}$ м (кружки)

Чтобы избавиться от задания достаточно неопределенной величины α и улучшить согласие в области малых размеров частиц, можно использовать формулу, суммирующую вклад броуновской диффузии и седиментации:

$$u_d(d) = u_g(d) + 0,075 u^* Sc^{-2/3}, \quad (8.22)$$

которая является более универсальной.

На рис. 8.13 сплошной линией приведены скорости осаждения, рассчитанные по (8.22). Следует отметить, что для гладкой горизонтальной подстилающей поверхности результаты расчетов по формулам (8.22) и (8.15) практически совпадают. К сожалению, для шероховатых поверхностей аппроксимация (8.22) дает занижающие значения, поэтому для консервативных оценок рекомендуется пользоваться развитой выше методологией.

Глава 9

ДИНАМИКА ФОРМИРОВАНИЯ ИСТОЧНИКОВ ВЫБРОСА

На отмели Незнаемого моря
Синдбад-скиталец подобрал бутылку,
Заклепанную
Соломоновой печатью,
И, вскрыв ее, внезапно впал во власть
В ней замкнутого яростного Джина.
Освободить и разнудать не трудно
Неведомые дремлющие воли:
Трудней заставить их себе повиноваться.

М. Волошин. Путиами Каина. Магия

В реальных условиях процессы формирования атмосферных аэрозолей происходят на фоне сложных газодинамических течений, обусловленных либо тепловым и газодинамическим влиянием источника выброса (формирование источников), либо обычными атмосферными процессами (атмосферный перенос). Очевидно, что в практических задачах охраны окружающей среды и безопасности описание процессов формирования источников и атмосферного переноса должно быть составной частью общей задачи о кинетике превращений аэрозольных частиц в атмосфере и их влиянии на окружающую среду.

С физической точки зрения задача о формировании источников промышленных и аварийных выбросов обладает определенной спецификой, связанной с динамическим характером процессов в окрестности выброса, в особенности на начальной стадии формирования источников. В этом случае формируются большие концентрации аэрозольных частиц, и процессы коагуляции идут особенно интенсивно. Пространственное и временное распределение загрязняющих примесей в источнике на той стадии, когда с атмосферными процессами конкурируют процессы подъема разогретого газа и его направленного движения, играет важную роль для определения картины выпадения загрязнений в локальной и средней зонах. Проблемы формирования динамических

источников выброса (струя горения, облако взрыва) рассмотрены в работах (Никонов, Пискунов, 1993; Гончаров и др., 1995), где построены инженерные модели, описывающие динамику развития процессов выброса.

В данной главе описаны результаты работ в области моделирования динамических процессов формирования источников выброса. В разд. 9.1 описана модель формирования струи выброса, в разд. 9.2 — аналогичная модель для подъема облака взрыва, а в разд. 9.3 рассмотрена общая картина аварийного взрыва, вытекающая из анализа экспериментальных результатов и оценок по расчетно-теоретическим моделям. В разд. 9.4 приведены результаты численного моделирования некоторых аварийных процессов, а в разд. 9.5. рассмотрено численное моделирование динамики формирования аэрозольных частиц при больших пожарах. Материалы главы могут использоваться при создании методов моделирования и разработке численных моделей, а также для анализа и решения конкретных проблем в области охраны окружающей среды и безопасности.

9.1. Модель формирования струйного выброса

Как уже говорилось выше, при определении последствий воздействия на окружающую среду различного рода промышленных или аварийных выбросов важную роль играет пространственное и временное распределение загрязняющих веществ в атмосфере на той стадии, когда с атмосферными процессами конкурируют процессы подъема разогретого газа и его направленного движения. Одна из простых инженерных моделей, описывающих трехмерную картину подъема и расширения струи разогретого газа в атмосфере, рассмотрена в работе (Никонов, Пискунов, 1993). В модели учитывается подъем за счет архимедовой силы, снос струи в трехмерном поле атмосферных течений и расширение струи за счет ее перемешивания с окружающим холодным воздухом. Существенным упрощением является то, что все величины, характеризующие струю, предполагаются изменяющимися только в направлении движения лагранжева элемента струи. Данная модель может служить для определения полной картины течений, на фоне которых следует рассматривать движение отдельных аэрозольных частиц (увлечение потоком, седиментацию).

Аналогично работе (Никонов, Пискунов, 1993) рассмотрим развитие струи при выбросе нагретых газов в атмосферу, характеризуемую полями скорости ветра $\mathbf{V}$, температуры T и давления P . В точке выхода струи зададим начальный радиус сечения струи, начальный перегрев, модуль и направление скорости истечения газов. Рассмотрим элемент струи, содержащий «секундную» массу m , которая определяется выражением $m = \rho' S u$, где ρ' — плотность воздуха в струе; S — площадь сечения, перпендикулярного оси струи (см. рис. 9.1). Будем предполагать, что сечение S в плоскости, перпендикулярной $\mathbf{u}$,

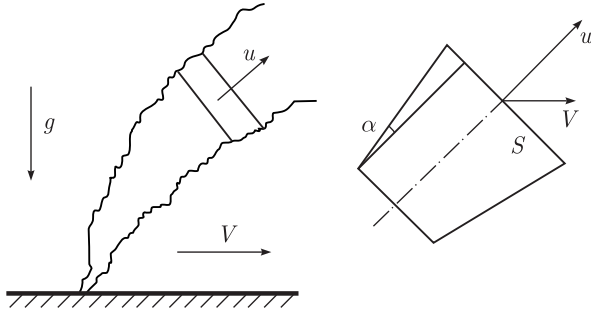


Рис. 9.1. Геометрия задачи и основные обозначения

представляет собой круг радиусом R . Предположим также, что все величины, характеризующие струю, постоянны в плоскости сечения S .

При движении на элемент струи будет действовать сила плавучести. Поскольку происходит перемешивание с окружающим воздухом, то масса этого элемента будет меняться. Поэтому в качестве уравнения движения для элемента струи необходимо использовать уравнение динамики тела с переменной массой (Мещерский, 1952), которое в нашем случае примет вид

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\mathbf{g} \frac{T' - T}{T} - (\mathbf{u} - \mathbf{V}) \frac{1}{m} \frac{dm}{dt}, \quad (9.1)$$

где $\mathbf{u}$, T' — скорость и температура газов в струе; $\mathbf{V}$, T — скорость и температура атмосферного воздуха; m — «секундная» масса; $\mathbf{g}$ — ускорение свободного падения. Первый член в (9.1) — ускорение, вызванное силой плавучести, второй — ускорение, вызванное смещением газов струи с окружающим воздухом. Выражение для приращения «секундной массы» имеет вид

$$\frac{1}{m} \frac{dm}{dt} = -\frac{1}{T'} \frac{dT'}{dt} + \mathbf{Z} \frac{d\mathbf{u}}{dt} + \varphi, \quad (9.2)$$

где

$$\mathbf{Z} = \frac{\mathbf{u}}{u^2}; \quad \varphi = \frac{2}{R} \frac{dR}{dt} + (\mathbf{g}\mathbf{u}) \frac{\mu}{R_G T}. \quad (9.3)$$

Здесь μ — молярная масса газов в струе; R_G — газовая постоянная. Уравнение движения (9.1) после подстановки (9.2) и (9.3) примет вид

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\mathbf{g} \frac{T' - T}{T} - (\mathbf{u} - \mathbf{V}) \left[-\frac{1}{T'} \frac{dT'}{dt} + \mathbf{Z} \frac{d\mathbf{u}}{dt} + \varphi \right]. \quad (9.4)$$

Уравнение для температуры газов в элементе струи можно получить из уравнения для теплосодержания $H = E + pV$ рассматриваемого элемента:

$$d_t H = d_t Q + \Omega d_t P, \quad (9.5)$$

где Q — количество тепла; Ω — объем газов в элементе струи. Если предположить, что движение струи адиабатично, то $dQ/dt = 0$. Здесь мы пренебрегли теплотой конденсации паров воды, которые могут находиться в струе. Это оправдано в том случае, когда концентрация паров воды невелика или относительная влажность в струе меньше 100%. Изменение теплосодержания элемента струи будет происходить за счет изменения температуры газов в струе и за счет перемешивания с окружающим воздухом. Таким образом,

$$\frac{dT'}{dt} = -(T' - T) \frac{1}{m} \frac{dm}{dt} + \frac{(\mathbf{g}\mathbf{u})}{C'_p} \left(\frac{T'}{T} \right), \quad (9.6)$$

где первое слагаемое связано с перемешиванием струи с окружающим воздухом, а второе — с адиабатическим охлаждением струи при ее подъеме. После подстановки (9.2) в (9.6) окончательное уравнение для температуры элемента струи примет вид

$$\frac{dT'}{dt} = -\frac{T'}{T} (T' - T) \left[\mathbf{Z} \frac{d\mathbf{u}}{dt} + \varphi \right] + \frac{(\mathbf{g}\mathbf{u})}{C'_p} \left(\frac{T'}{T} \right)^2. \quad (9.7)$$

После подстановки (9.7) в (9.4) уравнение движения примет вид

$$A_{ik} \frac{du_k}{dt} = \left\{ -\mathbf{g} \frac{T' - T}{T} - (\mathbf{u} - \mathbf{V}) \left(\frac{T'}{T} \right) \left[\varphi - \frac{(\mathbf{g}\mathbf{u})}{C'_p T} \right] \right\}_i, \quad (9.8)$$

где $A_{ik} = \delta_{ik} + (T'/T)(\mathbf{u} - \mathbf{V})_i Z_k$. Уравнение для радиуса-вектора элемента струи очевидно:

$$d_t \mathbf{X} = \mathbf{u}. \quad (9.9)$$

Если ввести угол полураствора струи α , то для изменения радиуса сечения элемента струи R можно написать

$$d_t R = u \operatorname{tg}(\alpha). \quad (9.10)$$

Таким образом, замкнутая система уравнений динамики струи будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} d_t R &= u \operatorname{tg} \alpha; \quad d_t \mathbf{X} = \mathbf{u}; \\ A_{ik} \frac{du_k}{dt} &= \left\{ -\mathbf{g} \frac{T' - T}{T} - (\mathbf{u} - \mathbf{V}) \left(\frac{T'}{T} \right) \left[\varphi - \frac{(\mathbf{g}\mathbf{u})}{C'_p T} \right] \right\}_i; \\ \frac{dT'}{dt} &= -\frac{T'}{T} (T' - T) \left[\mathbf{Z} \frac{d\mathbf{u}}{dt} + \varphi \right] + \frac{(\mathbf{g}\mathbf{u})}{C'_p} \left(\frac{T'}{T} \right)^2. \end{aligned} \quad (9.11)$$

Предполагается, что зависимость угла α от основных параметров задана. Данная система обобщает результаты работы (Качурин, Морачевский, 1965) на трехмерный случай. Некоторые расчеты динамики

подъема и высот стабилизации струи, иллюстрирующие применение данной модели, приведены в работе (Никонов, Пискунов, 1993).

Данная модель позволяет описывать достаточно широкий круг задач: мощные струйные выбросы с произвольным направлением, процессы горения на открытой поверхности. Она ориентирована на применение для произвольных полей профилей параметров атмосферы, что позволяет описывать динамические эффекты, обусловленные неравномерным по высоте переносом, температурными инверсиями и т. д. При практическом использовании модели основную трудность представляет задание конкретной зависимости угла полураствора α от других параметров. В общем случае значение α невозможно определить, исходя только из средних по сечению величин, поэтому для него приходится использовать эмпирические зависимости. Выделим в струе два участка: активный и пассивный. Активный участок характеризуется тем, что на нем турбулентность в струе значительно превышает атмосферную. Фактически здесь имеет место случай турбулентной затопленной струи, для которой при выбросе в покоящуюся среду $\alpha' = \text{const}$ (Ландау, Лифшиц, 1988). Подчеркнем, что при решении системы (9.11) необходим пересчет угла полураствора в используемую нами неподвижную систему координат: $\alpha' \rightarrow \alpha$. На пассивном участке необходимо принимать в расчет атмосферную турбулентность. В работе (Качурин, Морачевский, 1965) получено следующее выражение для тангенса угла полураствора струи на пассивном участке:

$$\text{tg}(\alpha) = \frac{2A^2D}{R|\mathbf{u}|}. \quad (9.12)$$

Дальнейшее развитие и совершенствование описанной модели струйного выброса в первую очередь должно быть связано с построением более детальной картины процесса перемешивания струи с воздухом (особенно в районе выхода), а также с более тщательной калибровкой модели на эксперименте.

9.2. Модель подъема облака взрыва

В качестве следующей практически важной задачи рассмотрим динамику движения облака нагретых газов (Piskunov et al., 1995a), например, облака, образовавшегося в результате взрыва. Как и в случае струи, движение облака будет определяться разностью температур газов облака и окружающего воздуха, а также перемешиванием с окружающим воздухом. Ограничимся случаем, когда температура и плотность распределены однородно внутри облака. Предположим сначала, что облако имеет форму шара радиусом R . Уравнение движения облака имеет вид (9.1), где $\mathbf{u}$ — скорость центра облака; T' — температура газов в облаке; $\mathbf{V}$, T — скорость и температура атмосферного воздуха; m — масса облака; g — ускорение свободного падения. Выражение

для массы облака имеет вид $m = \rho' \Omega$, где ρ' — плотность воздуха в облаке, Ω — его объем. Уравнение для температуры облака имеет вид (9.6), а уравнение для массы облака m определяется механизмом турбулентного перемешивания газов облака и окружающего воздуха. В первом приближении можно предположить, что уравнение для m имеет вид, аналогичный использованному в работе (Владимиров и др., 1991):

$$d_t \ln m = F_m, \quad (9.13)$$

где $F_m = \text{const}$. В общем случае F_m — есть функция, зависящая от температуры облака, его плотности и скорости подъема. В соответствии с этим система уравнений, описывающая динамику подъема облака нагретых газов, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{dT'}{dt} &= -(T' - T) F_m + \frac{(\mathbf{g}\mathbf{u})}{C'_p} \left(\frac{T'}{T} \right); \\ \frac{d\mathbf{u}}{dt} &= -\mathbf{g} \frac{T' - T}{T} - (\mathbf{u} - \mathbf{V}) F_m; \\ \frac{dR}{dt} &= \frac{R}{3} \left[\frac{1}{T'} \frac{dT'}{dt} - (\mathbf{g}\mathbf{u}) \frac{\mu}{R_G T} + F_m \right]; \quad \frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{u}. \end{aligned} \quad (9.14)$$

Рассмотрим теперь всплывающее под действием силы Архимеда облако как эллипсоид с отношением D_v/D_g , характеризующим его сплюснутость, где D_v и D_g — вертикальный и горизонтальный диаметры облака. Экспериментальные данные показывают, что достаточно хорошим приближением является $D_v/D_g = \text{const}$. При своем движении облако взаимодействует в единицу времени с массой воздуха

$$d_t m = \rho S_{\perp} |\mathbf{u} - \mathbf{V}|, \quad (9.15)$$

где ρ — плотность воздуха в атмосфере, а величина

$$S_{\perp} = \frac{\pi D_v^2}{4} \frac{|u_z|}{\sqrt{u_z^2 + |u_x - V_x|^2}} \left(1 + \frac{D_v^2}{D_g^2} \frac{|u_x - V_x|^2}{u_z^2} \right)^{1/2} \quad (9.16)$$

представляет собой площадь сечения эллиптического цилиндра, который касается эллипсоида вращения образующими, параллельными вектору относительной скорости движения облака (сечение перпендикулярно вектору скорости). Здесь принимается, что D_v — размер по оси z , а D_g — по оси x . Часть воздуха, с которым взаимодействует облако, намешивается внутрь облака, а другая часть после взаимодействия не перемешивается, но уносит импульс. Второе уравнение в (9.14) переписывается в виде

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\mathbf{g} \frac{T' - T}{T} - (\mathbf{u} - \mathbf{V}) F_m - \frac{d\mathbf{p}_a}{dt}, \quad (9.17)$$

где $\mathbf{p}_a$ — импульс воздуха, провзаимодействовавшего с облаком, но не попавшего в его объем. Пусть k — доля воздуха, который перемешивается с облаком, тогда

$$\frac{1}{m} \frac{dm}{dt} = \frac{k}{\rho' V} \rho S_{\perp} |\mathbf{u} - \mathbf{V}|, \quad (9.18)$$

где $V = \pi D_v^2 D_g / 6$ — объем эллипсоида вращения. Перепишем (9.18) в следующем виде:

$$\frac{1}{m} \frac{dm}{dt} = \frac{3k}{2} \frac{|u_z|}{\xi D_r} \left(\frac{D_g}{D_v} \right) \left(1 + \frac{D_v^2}{D_g^2} \frac{|u_x - V_x|^2}{u_z^2} \right)^{1/2}, \quad (9.19)$$

где ξ — отношение плотности вещества в облаке к плотности окружающего воздуха. Кроме того,

$$d_t \mathbf{p}_a = \alpha (\mathbf{u} - \mathbf{V}) (1 - k) \rho_a S_{\perp} |\mathbf{u} - \mathbf{V}|. \quad (9.20)$$

Здесь коэффициент α учитывает, что часть воздуха, которая после взаимодействия с облаком не перемешивается с ним, может двигаться со средней относительной скоростью, не совпадающей со скоростью $\mathbf{u} - \mathbf{V}$. Используя (9.19) и (9.20), перепишем закон сохранения импульса (второе уравнение в (9.14)) следующим образом:

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\mathbf{g} \frac{T' - T}{T} - a (\mathbf{u} - \mathbf{V}) b \frac{|u_z|}{\xi D_g} \left(1 + \frac{D_v^2}{D_g^2} \frac{|u_x - V_x|^2}{u_z^2} \right)^{1/2}. \quad (9.21)$$

Здесь введены обозначения $a = 1 + \alpha(1 - k)/k$, $b = 3kD_g/2D_v$. Таким образом, в предлагаемой модели функция F_m из (9.13) представляется в виде

$$F_m = b \frac{|u_z|}{\xi D_g} \left(1 + \frac{D_v^2}{D_g^2} \frac{|u_x - V_x|^2}{u_z^2} \right)^{1/2}. \quad (9.22)$$

В работе (Гончаров и др., 1995) для частного случая постоянного градиента температуры по высоте и при нулевой скорости получено аналитическое решение системы уравнений динамики облака, показывающее, что высота стабилизации (высота, на которой плотность газов внутри облака сравнивается с плотностью окружающего воздуха) верхушки облака определяется параметром « b », а время подъема облака на максимальную высоту — только параметром « a ». По данной модели в работах (Piskunov et al., 1995a; Гончаров и др., 1995) рассчитана динамика всплывания облака для 23 реальных наземных взрывов серии Roller Coaster (Luna et al., 1971; Boughton and DeLaurentis, 1992) с эффективной массой взрывчатого вещества в диапазоне 53,5–1270 кг. Для расчетов с постоянными параметрами $a = 1,5$, $b = 1,4$ и с постоянным отношением D_v/D_g , равным 0,65, численные результаты неплохо согласуются с экспериментальными как в условиях устойчивой, так и неустойчивой атмосферы.

9.3. Общая картина аварийного взрыва

Задача о динамике процесса аварийного взрыва конечно же не ограничивается описанием подъема облака, которым мы занимались в предыдущем разделе, а представляет собой целый комплекс физических и физико-химических проблем, решение которых еще далеко от завершения. Тем не менее, перечисление основных процессов и сводка некоторых характерных параметров очень важны для понимания общей картины воздействия аварийного взрыва на окружающую среду. Ниже в основном нас будут интересовать процессы, обуславливающие формирование источника аэрозольных частиц и их перенос в атмосфере при гипотетических неядерных взрывах с диспергированием радиоактивных веществ (РВ).

Причиной аварийного взрыва с диспергированием РВ, гипотетически могут служить аномальные воздействия (удар молнией; возгорание и последующая детонация ВВ в пожаре, механическое воздействие на ВВ при падении устройства), а также нерегламентированные действия персонала или диверсионные действия.

Процесс аварийного взрыва на открытой поверхности априори наиболее опасен для заражения местности диспергированными РВ. Достаточно полные экспериментальные данные для этих условий получены в целевой программе опытов Roller Coaster (Luna et al., 1971) и серии отечественных опытов с применением имитаторов РВ (Mikhailov and Khizhnyakov, 1998). На рис. 9.2 приведены кадры киносъемки, выполненной в одном из таких экспериментов сотрудниками ВНИИЭФ А. И. Паленовым и В. А. Цыгановым.

На первых двух кинокадрах рис. 9.2 можно четко выделить начальную стадию формирования облака взрыва, когда за время $\sim 0,1\text{--}1$ с облако замедляет свое расширение, принимая форму полусферы с диаметром в десяток метров. При этом давление в облаке выравнивается с атмосферным. На этих же кадрах рис. 9.2 в опытах с применением пиррофорного имитатора РВ фиксируются многочисленные трассы полета крупных осколков, вылетающих со скоростями в несколько километров в секунду. Траектории наблюдаются до расстояний $R \sim 60\text{--}100$ м, пока скорости полета не становятся дозвуковыми и не прекращается унос массы с поверхности осколков, обусловленный их аэродинамическим нагревом, химическими реакциями и сдувом жидкой пленки. При этом светящиеся траектории практически прямолинейны, а суммарный унос массы на расстояниях $R \sim 60\text{--}100$ м, по нашим оценкам, также незначителен. Часть траекторий разветвляется за счет дробления осколков на фрагменты. Доля массы имитатора, которая уносится из облака взрыва в виде осколков, в данных экспериментах не определялась.

Предварительные результаты других экспериментов, в которых производилось улавливание осколков на небольших расстояниях, дает грубую оценку массы, диспергированной при фрагментации в виде

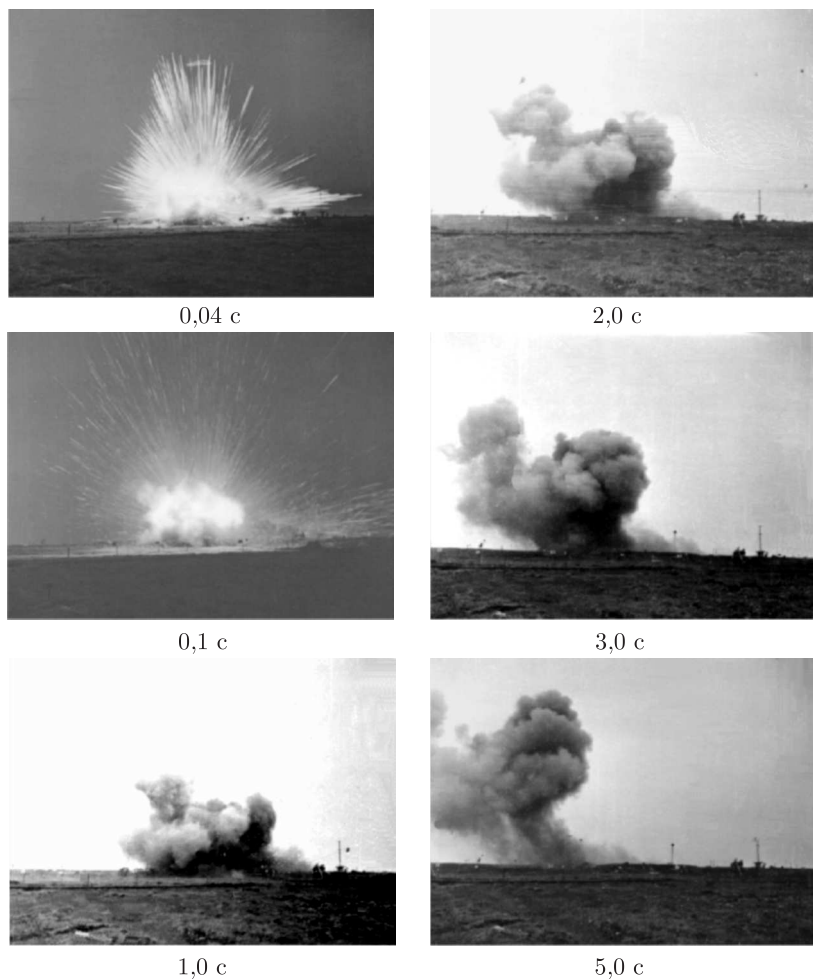


Рис. 9.2. Результаты съемки процесса взрыва в одном из целевых экспериментов

наиболее крупных осколков, в количестве $\sim 5\%$ от полной массы имитатора.

В дальнейшем начинается подъем облака со скоростями порядка 10 м/с, причем между подстилающей поверхностью и облаком, принимающим форму, близкую к сферической, образуется мощный пылевой столб (см. следующие кадры рис. 9.2). В некоторых опытах можно наблюдать превращение сферического облака в тороидальный кольцевой вихрь (ТКВ), а в единичных опытах происходило расслоение облака на части. Динамика подъема облака и изменения его размеров в целом хорошо описывается моделью, представленной в разд. 9.2 и откалиб-

рованной на опытах серии Roller Coaster. Видимые размеры облака сначала увеличиваются, затем с течением времени облако рассеивается в атмосфере и становится невидимым из-за малой оптической толщины. В проведенных опытах облако взрыва становилось невидимым через несколько минут. Кадры киносъемки, иллюстрирующие отбор проб самолетом-лабораторией, были приведены в разд. 1.7 на рис. 1.6.

Исходя из анализа экспериментальных результатов и расчетно-теоретических моделей, в работе (Piskunov et al., 1995a) выделено три стадии развития процесса аварийного взрыва. Во время первой — наиболее динамичной (см. первые два кадра на рис. 9.2) формируются начальное распределение РВ в пространстве (с учетом взаимодействия с грунтом подстилающей поверхности) и распределение первичных частиц, содержащих РВ, по размерам (спектр частиц). На второй стадии — промежуточной (см. последующие кадры на рис. 9.2) происходит формирование динамического объемного источника частиц, обусловленное подъемом облака взрыва и вовлечением в него частиц грунта с подстилающей поверхности. На третьей стадии — заключительной (см. рис. 1.6) происходит перенос частиц РВ направленными атмосферными течениями, рассеяние облака частиц за счет атмосферной турбулентной диффузии и осаждение частиц в поле тяжести (седиментация).

Первая стадия аварийного взрыва. При детонации ВВ часть энергии ВВ переходит во внутреннюю энергию РВ, что приводит к частичному испарению и плавлению РВ. При последующем разлете РВ происходит их диспергирование на мелкие частицы (аэрозоли) за счет следующих процессов:

- конденсации паров РВ в виде субмикронных аэрозолей;
- дробления жидкой фазы РВ на капли с характерным размером 1–100 мкм;
- дробления твердой фазы РВ на осколки с размером до нескольких миллиметров;
- интенсивного сгорания капель и осколков в атмосфере разогретых продуктов взрыва (ПВ).

За счет вброса грунта с подстилающей поверхности и интенсивного турбулентного перемешивания на стадии разлета мелкодисперсные частицы РВ могут коагулировать с частицами грунта, образуя композитные аэрозоли смешанного химического состава. Разлет ПВ тормозится за счет передачи энергии окружающему воздуху и для энергии ВВ $E \sim 100\text{--}5000$ МДж давление ПВ сравнивается с атмосферным за времена $t \sim 0,1\text{--}1$ с. Облако ПВ при этом стабилизируется, имея пониженную плотность и повышенную температуру порядка тысяч градусов, его радиус $R \sim 5\text{--}20$ м. Мелкие частицы резко тормозятся в облаке ПВ и затем практически полностью повторяют движение газов в облаке. Крупные осколки размером ~ 1 мм вылетают из облака ПВ со скоростями до нескольких километров в секунду, тормозятся, неполностью сгорают и дробятся в атмосфере, образуя вторичное

облако мелкодисперсных аэрозолей РВ с характерным радиусом облака 100–500 м.

Таким образом, после первой стадии аварийного взрыва часть РВ (до 30%) выпадает в локальной окрестности точки взрыва. Остальные РВ находятся в первичном облаке разогретых ПВ ($R \sim 5\text{--}20$ м) в виде мелкодисперсных частиц, составленных из РВ и грунта; кроме того, образуют вторичное облако РВ ($R \sim 100\text{--}500$ м) за счет сгорания крупных осколков. Данные по балансу распределения аэрозолей РВ между первичным и вторичным облаками практически отсутствуют (по грубой оценке, масса, диспергированная при фрагментации в виде наиболее крупных осколков, составляет $\sim 5\%$). Преимущественной химической формой РВ в аэрозолях являются двуокислы с плотностью ~ 11 г/см³, кроме того, за счет коагуляции с частицами грунта образуются композитные аэрозоли с пониженной плотностью до 3 г/см³. Вторичное облако частиц РВ находится в атмосфере, которая практически не возмущена аварийным взрывом (исключая, конечно, ситуации, когда процесс взрыва сопровождается крупномасштабным пожаром), и дальнейший перенос частиц РВ в этом облаке определяется атмосферными процессами (см. третью стадию аварийного взрыва).

Вторая стадия аварийного взрыва. После первой стадии разогретое облако малоплотных ПВ за счет архимедовой силы поднимается в атмосфере со скоростями $v_a \sim 10$ м/с, образуя при подъеме ТКВ и формируя вблизи подстилающей поверхности поле течений, втягивающее в облако частицы грунта из поверхностного слоя воздуха и с подстилающей поверхности. При этом, как и на первой стадии, продолжается формирование композитных частиц, составленных из РВ и грунта. Эти частицы имеют сложный морфологический и химический состав, их плотность $\sim 3\text{--}11$ г/см³, спектр частиц заключен в широком диапазоне размеров $d \sim 0,1\text{--}1000$ мкм (здесь d — эквивалентный аэродинамический диаметр). В целом дисперсный состав аэрозольных продуктов взрыва (АПВ) в облаке взрыва характеризуется значением $AMAD = 30\text{--}50$ мкм, доля содержания РВ в аэрозолях респираторной фракции $\sim 10\text{--}30\%$. Наиболее крупные частицы в спектре имеют большую скорость седиментации и успевают выпасть на местности в процессе подъема облака ПВ. Мелкодисперсная фракция поднимается с облаком ПВ и после его стабилизации по высоте определяет характер загрязнения местности на удалениях 10–100 км от точки взрыва.

Характерной особенностью аварийных взрывов с указанной выше энергией $E \sim 100\text{--}5000$ МДж является сравнимость удельных энергий турбулентных пульсаций в пограничном слое атмосферы и энергий ПВ. Это приводит к тому, что процессы атмосферной турбулентности существенно влияют на динамику подъема и рассеяние облака в атмосфере. В итоге облако ПВ (вместе с содержащимися в нем мелкодисперсными частицами РВ) за время порядка нескольких минут тормозится

и стабилизируется на высоте в сотни метров, имея характерные размеры в десятки-сотни метров. После стабилизации облака по высоте вторая стадия аварийного взрыва заканчивается. Во время первой и второй стадий часть РВ (до 30 %) выпадает в локальной окрестности точки взрыва.

Третья стадия аварийного взрыва. После стабилизации первичное облако ПВ–РВ (так же, как и вторичное облако РВ после окончания первой стадии) переносится и рассеивается в невозмущенной атмосфере. Дисперсный состав частиц РВ в облаке меняется только за счет гравитационного выпадения крупных частиц. В результате ведущими являются следующие процессы:

- перенос частиц РВ направленными атмосферными течениями;
- рассеяние облака частиц за счет атмосферной турбулентной диффузии;
- седиментация частиц в поле тяжести;
- взаимодействие частиц с подстилающей поверхностью.

Окончательная картина загрязнения местности формируется за времена, которые зависят от расстояния до точки взрыва и скорости ветра. Для расстояний в несколько километров это времена ~ 10 мин, для расстояний в сотни километров это времена порядка суток. Ингаляционное поступление РВ в организм при прохождении облака происходит примерно за такие же периоды времени. Дальнейшее долговременное поступление РВ в организм связано с занесением РВ в приземный слой воздуха за счет вторичного пылеобразования, что ограничивает пребывание и непосредственные работы на загрязненной местности.

Аварийный пожар. Картина формирования источника выброса и переноса загрязняющих примесей в атмосфере при пожаре отличается некоторыми весьма существенными деталями. В целом при пожаре в атмосферу выбрасывается от 1 до 20 % РВ (остальные РВ остаются в очаге пожара), образующиеся частицы имеют гораздо меньший размер (порядка нескольких микрометров), высота стабилизации струи составляет десятки метров, а результирующие зоны загрязнения по площади в десятки-сотни раз меньше, чем при взрывах.

9.4. Результаты численного моделирования некоторых аварийных процессов

Численное моделирование динамики развития аварийных процессов и прогноз их последствий в конкретных случаях представляют интерес не только с точки зрения практических приложений, либо калибровки методов расчета. Практика показывает, что ни один из полномасштабных экспериментов не описывается сразу — без адаптации моделей и отладки численных методов расчета, поэтому последовательность применения теоретических моделей и результаты численных расчетов очень важны для практической работы в этой области.

В данном разделе будут приведены наиболее важные результаты, полученные в процессе выполнения международных проектов и опубликованные в (Piskunov et al., 1995a; Piskunov, Aloyan, Marchuk et al., 1997b; Piskunov and Aloyan, 2002). При этом, будут приведены результаты конкретных расчетов не только по описанным в гл. 5, 7 и разд. 9.2, 9.3 моделям, но и по более сложным моделям и подходам (например, с использованием 2D–3D-программ). Эти результаты будут приведены здесь только в общем виде, а более подробное изложение многих из них можно найти в монографии (Алоян, 2008).

Модельная задача о подъеме облака взрыва. Задано облако аварийного взрыва, в котором равномерно распределено несколько фракций грунта и свинца. Рассчитывается задача о диффузии, коагуляции и седиментации этих фракций в процессе подъема облака взрыва и одновременном сносе его полем скоростей (Piskunov, Aloyan, Marchuk et al., 1997b). Задача считалась по комплексу TREK с учетом турбулентного перемешивания по 3D $k - \varepsilon$ -модели и с использованием параметризации приземного слоя. Получены данные по количеству свинца, оседающего на фракциях грунта и выпадающего в осадок в районе аварии.

По комплексу SRP эта задача считалась самосогласованным образом: одновременно рассчитывались трехмерные газодинамические течения в поле тяжести, турбулентное перемешивание в атмосфере и в облаке в $k - \varepsilon$ -приближении, пространственная диффузия 15 компонент различных примесей с учетом их седиментации и коагуляции. Расчет выполнен до момента 16 с. Получены подробные данные о распределении плотности и скорости среды, данные о распределении компонент примеси в атмосфере, данные по осаждению частиц свинца на частицы грунта и распределения частиц, осевших на подстилающую поверхность в районе аварии. На рис. 9.3 проиллюстрированы некоторые результаты этих расчетов.

Осаждение вредных примесей на частицы грунта при подъеме облака взрыва. Моделирование процессов формирования частиц в облаке взрыва представляет собой одну из наиболее важных задач, которая рассматривалась в работах (Piskunov et al., 1995a; Piskunov, Aloyan, Marchuk et al., 1997b; Piskunov and Aloyan, 2002). Результаты анализа АПВ, о которых шла речь в разд. 9.3, показывают, что аэрозольные частицы имеют композитный состав. Скорее всего, это обусловлено сильной коагуляцией частиц РВ и грунта между собой на первой и второй стадиях аварийного взрыва. Данная задача актуальна в строительстве и геологических работах, где широко используются взрывчатые вещества (ВВ), обладающие высокой калорийностью. При аварийном взрыве нескольких десятков килограмм ВВ выделяется энергия в сотни мегаджоулей. Она в несколько раз превышает энергию, необходимую для плавления или испарения материалов, аэрозоли которых представляют опасность для здоровья человека. Так, теплота

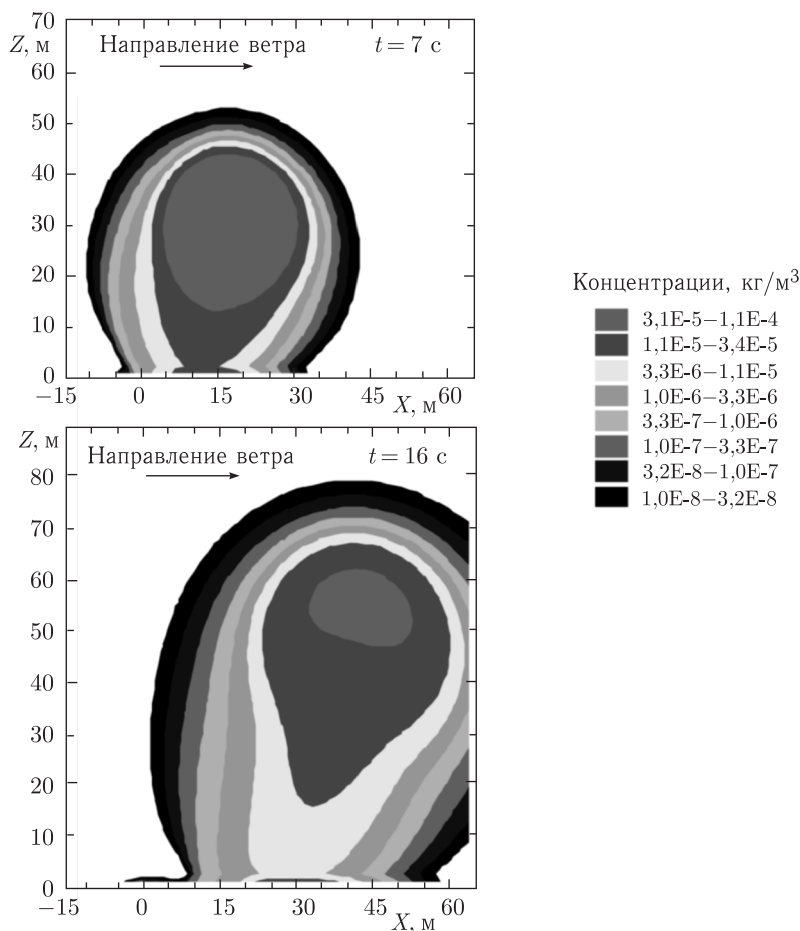


Рис. 9.3. Распределение концентраций примеси в продуктах взрыва. Результаты расчетов по программе SRP

плавления 1 кг свинца составляет ≈ 25 МДж, а теплота испарения 0,1 кг ртути составляет ≈ 30 МДж. Таким образом, при взрыве ртуть может испариться с последующей конденсацией в капли, а свинец может расплавиться и разрушиться на капли. В облаке аварийного взрыва, которое формируется над подстилающей поверхностью земли, эти вещества будут в основном представлены каплями (аэрозолями) респираторной фракции с аэродинамическим диаметром $d_a \leq 10$ мкм, которые особенно опасны при вдыхании. Однако, процессы коагуляции приводят к укрупнению суммарного спектра частиц за счет формирования композитных частиц на частицах грунта. Такая трансформация спектра выводит определенную долю аэрозолей свинца из респираторной фракции.

Таблица 9.1. Спектры частиц песчаного грунта и суглинка

d , мкм	0–7,5	15	35	100	250	550	850	1500	2500
Песок	0,011	0	0,025	0,453	0,323	0,136	0	0	0,052
Суглинок	0,156	0,235	0,442	0,132	0,032				

белой фракции и уменьшает экологическую опасность источника выброса.

Корректное описание процесса коагуляции композитных частиц стало возможным после появления моделей, описанных в гл. 5, и их численной реализации в программе AERFORM (Golubev et al., 1999). Расчеты формирования спектра частиц в процессе подъема облака на высоту стабилизации проведены по этим моделям в (Piskunov and Aloyan, 2002) для аварийного выброса с энергией 250 МДж, что отвечает взрыву ВВ массой примерно 50 кг. Известно, что при таком взрыве на поверхности земли формируется поле течений, вовлекающее в облако взрыва примерно 50 кг грунта. Будем предполагать, что частицы грунта и свинца (масса 1 кг, плотность $11,34 \text{ г/см}^3$) равномерно перемешаны в облаке продуктов взрыва, а спектр частиц грунта близок к его естественному дисперсному составу. Плотность частиц грунта массой 50 кг принималась равной $2,5 \text{ г/см}^3$. Расчеты проведены для песчаного грунта и суглинка, доли массы частиц грунта в интервалах диаметров приведены в табл. 9.1.

Динамика подъема облака выброса на высоту стабилизации рассчитывалась по модели, описанной в разд. 9.2. Скорость ветра была принята постоянной по высоте и равной 5 м/с. В начальной стадии подъема облако достигает максимальной скорости $\approx 6,7 \text{ м/с}$ и далее последовательно замедляется до скорости $\approx 1 \text{ м/с}$, когда плотность окружающего воздуха сравнивается с плотностью газов в облаке (из-за интенсивного намешивания воздуха подавляющая часть облака состоит из воздуха). Результаты расчетов по (Гончаров и др., 1995) были использованы в качестве начальных данных при моделировании кинетики коагуляции.

Кинетика формирования частиц в облаке взрыва рассчитывалась с помощью программы AERFORM. Кинематическая вязкость газов в облаке полагалась равной вязкости воздуха. Коэффициенты турбулентной коагуляции сильно зависят от скорости диссипации турбулентной энергии $\varepsilon = V^3/L$ (V и L соответственно скорость и масштаб турбулентных пульсаций). В рассматриваемых условиях ε изменяется от $\approx 3 \cdot 10^5 \text{ см}^2/\text{с}^3$ до значения $\approx 500 \text{ см}^2/\text{с}^3$, характерного для окружающего воздуха. Расчеты кинетики коагуляции проводились с постоянным значением ε , в основном, если не оговорено специально, принималось $\varepsilon = 10^4 \text{ см}^2/\text{с}^3$. Это значение характеризует начальную стадию подъема облака, когда из-за высокой концентрации частиц коагуляция особенно интенсивна. Вследствие увеличения объема обла-

Таблица 9.2. Результаты расчетов кинетики коагуляции частиц свинца на грунте в процессе подъема облака взрыва

Тип грунта	M_s , г	$d = 0,2$		$d = 1$		$d = 5$	
		M_c	M	M_c	M	M_c	M
Песок	49999,8	50626	627,6	50628,0	629,8	50640,2	642,3
Суглинок	50001	50408	404,8	50416	413,7	50468	465,1

ка и уменьшения концентрации частиц коагуляция практически завершается к моменту времени $t = 20$ с. Ниже приводятся окончательные результаты для кинетики коагуляции, полученные на момент стабилизации облака при $t = 100$ с.

Данные, представленные в табл. 9.2, получены для коагуляции свинцовых капель на частицах песка и суглинка. Во второй колонке приводятся результаты собственной коагуляции грунта в отсутствии частиц свинца. Видно, что коагуляция укрупняет начальный спектр частиц грунта. В последующих колонках таблицы приводятся результаты по коагуляции аэрозолей свинца на частицах грунта (M_s — масса частиц грунта, M_c — масса композитных частиц, M — масса частиц свинца в этих композитных частицах, d — диаметр частиц свинца).

Для рассмотренных размеров аэрозолей более 600 г частиц свинца осаждается на частицы песка и выбывает из респираторной фракции спектра. Спектр суглинка представлен более мелкими частицами, поэтому уменьшается содержание свинца в композитных частицах. Из табл. 9.2 видно, что в этом случае из респираторной фракции спектра аэрозолей выводится более 400 г свинца.

Проводились расчеты с отключенной коагуляцией частиц грунта между собой, а частицы свинца диаметром 1 мкм по-прежнему коагулировали с грунтом. При этом масса частиц свинца, осевших на грунт вне респираторного диапазона размеров, уменьшилась с 629,8 г до 603,8 г.

И, наконец, была проведена минимальная оценка трансформации спектра за счет гравитационного выпадения частиц. В правую часть уравнения кинетики коагуляции был добавлен член $-c(g, t)/\tau(g)$, учитывающий выпадение из облака чистых и композитных частиц вследствие гравитационного осаждения. Здесь: c — концентрация частиц массы g в момент времени t , τ — характерное время пребывания частиц в облаке. Для оценки τ использовалось выражение $\tau = 2R_v/U_g$, где U_g — скорость седиментации частиц. За счет гравитационного осаждения масса частиц свинца, осевших на грунт вне респираторного диапазона диаметров, уменьшилась с 629,8 до 303 г.

Совокупность проведенных расчетов показывает, что на стадии подъема облака выброса на высоту стабилизации происходит эффективная коагуляция вредных веществ на частицах грунта. Как следствие, суммарный спектр частиц укрупняется, а значительная часть

частиц вредного вещества осаждаются на частицах грунта вне диапазона диаметров респираторной фракции спектра. Такая трансформация спектра эффективно уменьшает экологическую опасность источника выброса и должна учитываться при прогнозе последствий аварий. Для конкретных условий, заданных в расчетах, из респираторной фракции может быть выведено от 30 до 60 % вредных аэрозолей.

Очистка загрязненного слоя воздуха поднимающимся термиком. Атмосферная конвекция, реализующаяся в виде всплытия отдельных термиков, может привести к изменениям вертикального распределения атмосферного аэрозоля. При этом, в случае влажной конвекции возможно два основных эффекта:

- вымывание аэрозолей за счет конденсации водяного пара на аэрозольных частицах или их коагуляции с каплями;
- чисто кинематический перенос аэрозоля по высоте за счет течения, возникающего при подъеме термика

Для исследования роли и вклада этих эффектов в (Piskunov and Aloyan, 2002) была использована 2D-постановка задачи о подъеме турбулентного термика, с помощью которой исследовались двумерные процессы формирования отдельных облаков в Сыктывкарском эксперименте (см. разд. 7.2 и рис. 7.5, 7.6). При этом в распределение атмосферного аэрозоля было внесено следующее изменение: на высотах от 800 до 1000 м был задан слой повышенной концентрации аэрозоля, в котором ее значение превышало в 2 раза соответствующее значение на уровне подстилающей поверхности. Это привело к некоторым изменениям в ходе микрофизических процессов, однако наибольший интерес в рассматриваемом случае представляет эволюция пространственного распределения атмосферного аэрозоля. На рис. 9.4 представлены поля

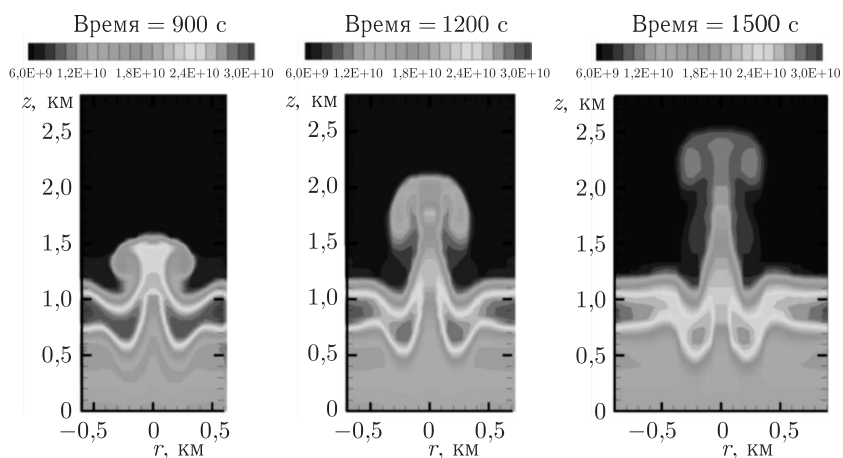


Рис. 9.4. Поля концентраций аэрозольных частиц (в $1/\text{м}^3$) на различные моменты времени

концентраций аэрозольных частиц на различные моменты времени. Сравнение данных, приведенных на рис. 7.5 и 9.4, показывает, что концентрация капель в термике на рис. 7.5 примерно на порядок ниже концентрации аэрозольных частиц на рис. 9.4, т. е. процесс поглощения аэрозолей каплями идет довольно слабо. Это служит косвенным свидетельством малого влияния процессов вымывания и коагуляции в данном случае.

Анализ рис. 9.4 позволяет также сделать вывод о том, что существует два конкурирующих механизма, определяющих перераспределение аэрозолей по высоте. С одной стороны, хорошо видно, как часть примеси захватывается течениями вблизи термика и переносится в вышележащие слои атмосферы, а также вовлекается в турбулентный след термика. С другой стороны, нисходящее течение, образующееся при подъеме термика, приводит к заметному (примерно на 300 м) опусканию части этого слоя.

Суммарный эффект этих двух процессов можно оценить по рис. 9.5, на котором представлены осредненные по цилиндру радиуса $R = 600$ м вертикальные профили концентрации аэрозоля на различные моменты времени. Из приведенных на рис. 9.5 результатов следует, что конвекция, вызванная подъемом термика, привела к заметному (примерно на 20 %) снижению концентрации аэрозоля в локальной области с $R \leq 600$ м. Причем хорошо видны описанные выше два качественно отличных механизма: часть аэрозоля захватывается атмосферой термика и переносится в вышележащие слои атмосферы в виде достаточно компактного образования. В то же время другая часть опускается в нисходящем течении, однако этот процесс вызывает заметное повышение средней концентрации аэрозоля лишь непосредственно вблизи нижней кромки загрязненного слоя.

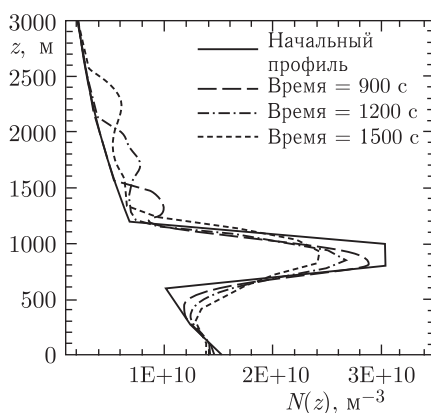


Рис. 9.5. Осредненные профили концентрации аэрозольных частиц, $1/\text{м}^3$, на различные моменты времени

9.5. Численное моделирование динамики формирования аэрозольных частиц при больших пожарах

Проникновение в атмосферу аэрозольных сажевых частиц при больших пожарах может приводить к изменениям оптических свойств атмосферы и, как следствие, к локальным и глобальным климатическим последствиям. В 80-е годы эта проблема интенсивно изучалась в связи исследованиями так называемой «ядерной зимы» (Экологические последствия..., 1988). Однако эта проблема представляет и более широкий интерес, что наглядно демонстрирует борьба с ежегодными пожарами в Сибири и в других лесных регионах земного шара.

Основными параметрами, от которых зависят характеристики загрязнения атмосферы при пожаре, являются распределения массы аэрозольных частиц по размерам и по высоте, определяющие оптические свойства частиц и их распространение в атмосфере. Эти параметры, в свою очередь, существенным образом зависят от динамики процессов коагуляции и конденсации в конвективных потоках при пожаре (Экологические последствия..., 1988).

Исследованию различных процессов в конвективных колонках пожаров посвящено большое количество работ. В частности, в работах (Гостинцев и др., 1990; Гостинцев и Рыжов, 1994; Музафаров и Утюжников, 1995) приведены результаты численного моделирования развития конвекции над очагом горения. В работе (Гостинцев и Рыжов, 1994) расчеты были проведены с учетом процессов горения в газовой фазе, однако в этих работах не учитывалось влияние возможной конденсации атмосферной влаги на параметры конвективной колонки. Расчеты, проведенные в работе (Penner et al., 1985) с учетом этого фактора, показали, что дополнительная сила плавучести, вызванная конденсацией атмосферного водяного пара, приводит к существенному увеличению высоты подъема конвективной колонки.

В указанных выше работах рассматривался только перенос продуктов горения восходящим течением, образующимся над очагом горения. В тоже время оптические свойства сажевых частиц в значительной мере зависят от динамики протекания процессов коагуляции (Snegirev et al., 2001). Кроме того, большой интерес представляет проблема вымывания сажевых частиц каплями, образующимися при конденсации водяного пара. Как отмечалось в работе (Penner et al., 1985), только модель с детальной микрофизикой, в которой процессы эволюции аэрозольных частиц описываются на основе рассмотрения кинетики конденсации/коагуляции, даст возможность правильно воспроизводить эти эффекты.

Для моделирования процессов турбулентного переноса в конвективной колонке использовалась модель турбулентности, в которой коэффициент турбулентной вязкости вычислялся как функция от тензора

скоростей деформации и некоторого масштаба. Такой подход достаточно широко используется в настоящее время при расчетах турбулентных течений с использованием метода моделирования крупных вихрей (LES-метод). Однако использованные в расчетах (Гостинцев и др., 1990; Гостинцев и Рыжов, 1994; Музафаров и Утюжников, 1995; Penner et al., 1985) сетки не обеспечивают достаточного для LES-метода разрешения. Кроме того, для расчета кинетики коагуляции аэрозольных частиц необходима информация о скорости диссипации турбулентной энергии, которая не обеспечивается при использовании указанного выше подхода. Поэтому в настоящей работе динамика конвективной колонки рассчитывалась по модели турбулентной конвекции (Dovgalyuk et al., 1994; Затевахин, 2001), основанной на использовании полуэмпирической модели турбулентности с двумя уравнениями. В качестве такой модели в настоящей работе использовалась стандартная $k - \varepsilon$ -модель без учета дополнительных слагаемых, обеспечивающих учет подавления турбулентности в вихревом ядре всплывающего термика (Dovgalyuk et al., 1994; Затевахин, 2001), поскольку в плавающей струе основным механизмом генерации турбулентности является сдвиговая деформация в периферийных слоях струи.

Для расчетов процессов формирования аэрозолей используется модель кинетики конденсации/коагуляции композитных частиц, описанная в гл. 5 и реализованная в программе AERFORM. На основе разработанной модели в (Piskunov and Zatevakhin, 2002; Затевахин и Пискунов, 2004) нами были проведены расчеты коагуляции сажевых частиц при конвекции в сухой атмосфере, а также рассмотрены процессы, происходящие при конденсации атмосферного водяного пара. Расчеты выполнены М. А. Затевахиным.

Постановка задачи. При формулировке уравнений тепломассопереноса предполагалось, что время скоростной и температурной релаксации частиц конденсированной фазы мало по сравнению с характерным временем развития процесса, поэтому можно использовать систему уравнений, описывающих турбулентное движение двухфазной двухкомпонентной среды в односкоростном однотемпературном приближении. Подробно эта система приведена в (Затевахин и Пискунов, 2004) и здесь мы ее выписывать не будем.

Рассматривалась динамика изменения спектров частиц в двухкомпонентной дисперсной системе, состоящей из конденсирующейся (вода) и неконденсирующейся (сажевые частицы) фракций. Считалось, что сажевые частицы не коагулируют между собой и являются малой примесью в каплях. Уравнения для изменения спектров частиц и методы их решения уже были описаны в разд. 9.3.

Следует отметить, что рассматриваемая задача относится к очень трудоемким с вычислительной точки зрения: поскольку численное решение уравнений коагуляции требует числа операций, пропорционального квадрату числа узлов сетки в пространстве масс, то по

трудоемкости эта задача эквивалентна решению нестационарных четырехмерных уравнений газодинамики. Приведенные в настоящей работе результаты получены на пространственной сетке 31×61 , сетка в пространстве масс при расчетах коагуляции в сухой атмосфере имела 21 узел, а при учете конденсации водяного пара — 67 узлов. В первом случае она охватывала частицы размером от 0,05 до 1 мкм, а во втором — до 1000 мкм, причем используемое экспоненциальное распределение узлов в пространстве масс обеспечило их совпадение в пределах первого диапазона в обоих случаях.

Начальные, граничные и фоновые условия соответствовали постановке задачи работы (Гостинцев и др., 1990), в которой приведены результаты численного моделирования экспериментального пожара (Palmer and Northcutt, 1975). В начальный момент времени в расчетной области задавались распределения, соответствующие состоянию невозмущенной атмосферы. Распределение атмосферной температуры соответствовало Стандартной модели атмосферы СССР 1964 г. (Глаголев, 1971): температура на уровне подстилающей поверхности 288,15 К, давление — 101 325 Па, высота тропопаузы 11000 м, температурный градиент от подстилающей поверхности до тропопаузы постоянен и равен 6,5 К/км, распределение давления удовлетворяет уравнению гидростатики. При расчетах в сухой атмосфере ее влажность полагалась равной нулю, а при расчетах с учетом конденсации водяного пара его распределение соответствовало постоянной относительной влажности 80 % до высоты 5500 м, а выше она линейно убывала до значения 10 % на уровне тропопаузы.

На подстилающей поверхности задавался тепловой поток, который в течение первых 5 мин линейно нарастал от нуля до величины $2,3 \times 10^5$ Вт/м². Радиус моделируемого очага пожара составлял 200 м. Интенсивность потока массы аэрозольных частиц для таких пожаров соответствует значению $0,03q/q_0$, где $q_0 = 19,6 \cdot 10^6$ Дж/кг — теплотворная способность топлива, q — тепловой поток (Экологические последствия..., 1988; Гостинцев и др., 1990). При расчетах это значение корректировалось для обеспечения правильного потока числа сажевых частиц с учетом принятой в настоящей модели плотности этих частиц. Предполагалось, что эти частицы имеют моодисперсное распределение с радиусом 0,05 мкм (Экологические последствия..., 1988; Snegirev et al., 2001), частицы считались нерастворимыми.

Результаты расчетов. Обсудим результаты, полученные при расчетах развития конвективной колонки в сухой атмосфере. Расчеты показали, что начальная стадия подъема струи существенно зависит от параметров турбулентности, задаваемых в невозмущенной атмосфере. При низком уровне фоновой турбулентности подъем струи происходит существенно быстрее, однако переход в стадию зависания характеризуется существенной неустойчивостью. Тем не менее, картина течения после достижения струей максимальной высоты подъема, показан-

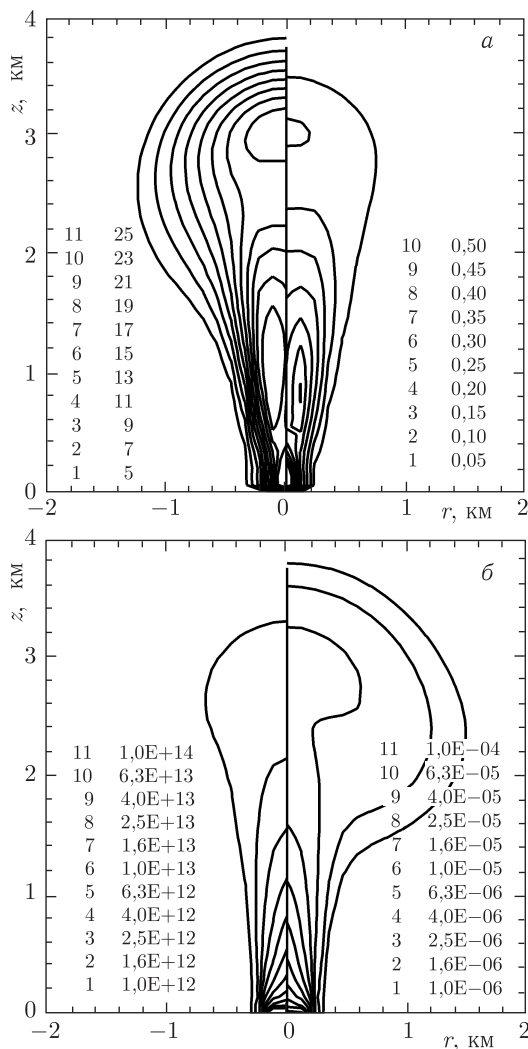


Рис. 9.6. Картина течения на момент времени 30 мин; а — распределения кинетической энергии турбулентности, m^2/s^2 , (слева) и скорости ее диссипации, m^2/s^3 , (справа); б — распределения счетной, $1/\text{m}^3$, (слева) и массовой, kg/m^3 , (справа) концентраций аэрозольных частиц

ная на рис.9.6, фактически не зависит от значений фоновой турбулентности.

Полученные результаты согласуются с общей картиной развития процесса, приведенной в работе (Гостинцев и др., 1990). Скорость восходящего течения достигает 26 м/с, в работе (Гостинцев и др.,

1990) было получено 27 м/с, а экспериментально измеренные значения (Palmer and Northcutt, 1975) находились в интервале 24–30 м/с. Для оценки высоты подъема конвективной колонки в работе (Тернер, 1977) предложена формула, согласно которой эта высота в рассматриваемом случае составляет 3400 м. Примерно такие же значения дают и формулы, приведенные в работах (Гостинцев и др., 1990; Музафаров и Утюжников, 1995).

На рис. 9.6, а приведены полученные в расчетах параметры турбулентности. Максимальное значение скорости диссипации турбулентной энергии достигает $1 \text{ м}^2/\text{с}^3$, что соответствует приведенным в работе (Экологические последствия..., 1988) данным.

На рис. 9.6, б приведены распределения счетной и массовой концентраций аэрозольных частиц. Эти распределения построены с использованием одинаковой шкалы относительных уровней. Хорошо видно, что счетная концентрация убывает с высотой гораздо быстрее, чем массовая.

Для более детального анализа этого эффекта рассмотрим рис. 9.7, на котором приведены функции распределения аэрозольных частиц на различных высотах, нормированные на их массовую концентрацию. Как видно из этого рисунка, непосредственно вблизи источника довольно быстро образуются частицы удвоенной массы (размером порядка 0,065 мкм), которые затем коагулируют только с мелкодисперсной фракцией, уменьшая счетную концентрацию первичных частиц.

Образовавшиеся сажевые частицы могут служить ядрами конденсации для содержащегося в атмосфере водяного пара. В работе (Эколо-

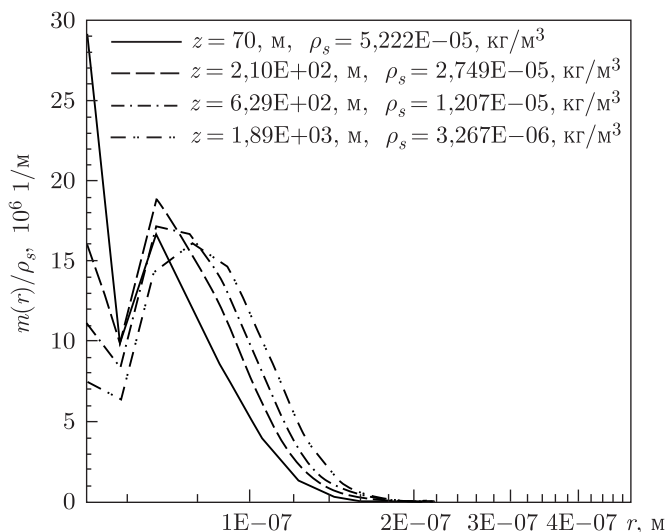


Рис. 9.7. Функция распределения массы частиц на различных высотах

гические последствия..., 1988) отмечается, что эффективность частиц дыма как ядер конденсации невысока и зависит от их химического состава. Этот вопрос требует дополнительных исследований, ясно лишь, что эти частицы по крайней мере не являются растворимыми, поэтому результаты описанных ниже расчетов могут рассматриваться как оценка эффективности вымывания сверху.

Рассмотрим развитие процесса во влажной атмосфере. На рис. 9.8 показаны поля водности и суммарной концентрации обводненных и необводненных сажевых частиц на момент времени 30 мин. Сравнение этих результатов с приведенными на рис. 9.6, б данными показывает, что в этом случае сажа поднимается на заметно большую высоту. Однако основная масса воды, образующая облако, располагается существенно выше, а вовлекаемые в восходящее течение частицы в основном сосредоточены в нижней части облака вблизи оси симметрии. Эта особенность обуславливает достаточно низкую эффективность их вымывания. Степень обводнения аэрозольных частиц медленно возрастает с увеличением высоты, и в верхней части облака примерно половина их массы оказывается включенной в водяные капли. Однако количество таких частиц составляет всего 10% от общей массы, выделившейся за время пожара.

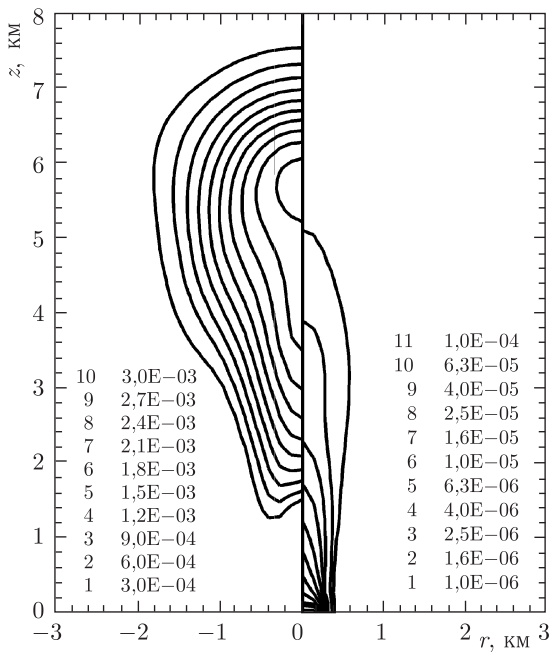


Рис. 9.8. Поля водности (слева) и массовой концентрации сажевых частиц (справа), кг/м^3 , на момент времени 30 мин

Пересыщения в облаке не превышают 1%, а в большей его частиц составляют всего 0,5%. Это позволяет предположить, что процесс конденсации носит равновесный характер. Действительно, расчеты, проведенные по равновесной модели (Затевахин, 2001), в которой предполагалось, что вся масса водяного пара выше линии насыщения мгновенно переходит в конденсированную фазу, дали результаты, практически совпадающие с описываемыми. Такое совпадение сохраняется примерно до 20 минуты развития процесса, после чего начинают появляться признаки коагуляции водяных капель.

Равновесное пересыщение, необходимое для конденсации водяного пара на частицах радиусом r может быть оценено по формуле $S = \exp(2\sigma\sigma_q/rkT)$, где σ — поверхностное натяжение, q — объем молекулы жидкости, k — постоянная Больцмана. Для частиц радиусом 0,05 мкм необходимая величина пересыщения составляет 2%, что существенно меньше приведенных выше значений. Для выяснения причин такого эффекта рассмотрим рис. 9.9, на котором приведены функции распределения массы частиц конденсированной фазы и относительная концентрация содержащихся в них сажевых частиц $c(g)$. Во-первых, отметим, что вид функции $c(r)$ позволяет легко выделить три основных типа частиц: сухие сажевые частицы, $c(r) = 1$; частицы, выросшие за счет конденсации, когда $c(r)$ монотонно убывает с ростом

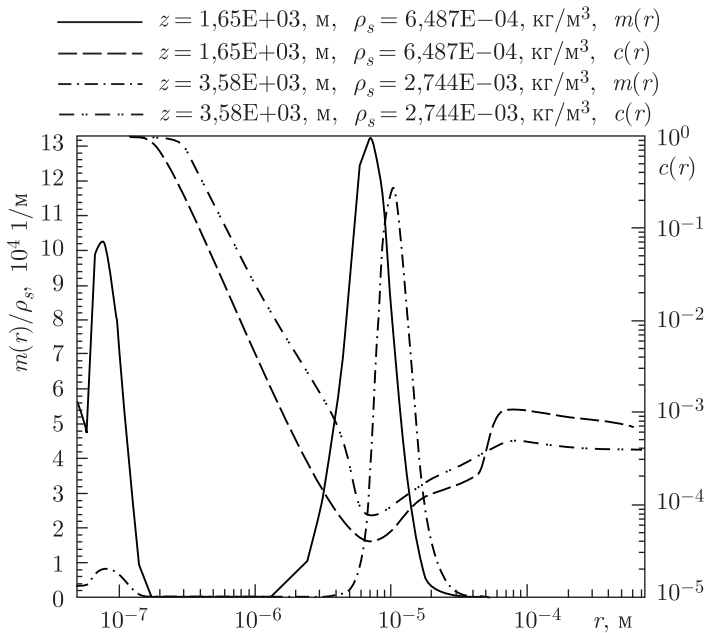


Рис. 9.9. Функция распределения массы частиц и концентрация неконденсирующегося компонента на различных высотах

размеров частиц; и частицы преимущественно коагуляционного происхождения, когда $c(r)$ постоянна. Принимая это во внимание, обсудим приведенные на рис. 9.9 результаты.

Рассмотрим сначала данные, относящиеся к высоте 1650 м — эта точка расположена непосредственно вблизи уровня конденсации. Во-первых, хорошо видно, что частицы размером меньше 0,15 мкм не обводнены. Более того, детальный анализ показывает, что спектр частиц в этой части практически совпадает со спектром, приведенным на рис. 9.7. Это означает, что практически все $2 \cdot 10^{12}$ 1/м³ (см. рис. 9.6) сажевых частиц остаются сухими. В то же время на этой высоте уже наблюдаются капли радиусом 7 мкм. Концентрация сажевых частиц в них составляет $4 \cdot 10^{-5}$, что позволяет оценить радиус их аэрозольного ядра. Несложные вычисления показывают, что он равен 0,24 мкм. Этот результат хорошо согласуется с приведенными выше значениями пересыщений в облаке. Число таких капель на несколько порядков меньше общей концентрации аэрозольных частиц. Таким образом, эти капли растут на самых больших аэрозольных частицах, образовавшихся в процессе коагуляции, следовательно процесс коагуляции сажевых частиц имеет существенное значение для возможности конденсации на них водяного пара.

По мере подъема до высоты ≈ 3600 м число частиц сухой фракции внутри облака заметно уменьшается, водяные капли вырастают до 10 мкм. Очевидно, что основной причиной уменьшения их концентрации является турбулентное перемешивание.

Поскольку основным механизмом, изменяющим спектр, а значит и оптические свойства аэрозолей, является коагуляция, интересно сравнить скорости этого процесса в обоих рассмотренных случаях. Такое сравнение представлено на рис. 9.10, где приведены значения функции

$$K_{nn} = \int_0^\infty \int_0^\infty K(g, s) n(s) n(g) dg ds / \int_0^\infty n(g) dg,$$

характеризующей скорость коагуляции. Из рис. 9.10 видно, что в случае влажной конвекции характерное время коагуляции составляет примерно 200–300 с, это примерно в 2–3 раза меньше, чем в сухой атмосфере (без конденсации водяного пара).

Выполненные по данной модели расчеты динамики подъема струи согласуются с экспериментальными и расчетными данными других авторов. Расчет процессов формирования частиц с учетом конденсации водяного пара при развитии пожара во влажной атмосфере показывает, что выделение теплоты конденсации приводит к увеличению высоты подъема сажевых частиц. Показано также, что во влажной атмосфере на сажевых частицах вырастают достаточно крупные капли. Полученные результаты могут быть уточнены, если учесть специфические свойства сажевых частиц, а также наличие гигроскопических атмосферных

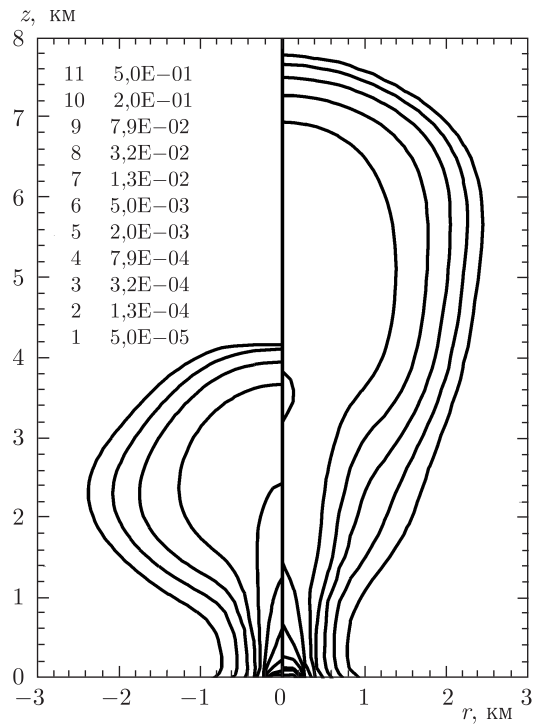


Рис. 9.10. Распределения скорости коагуляции K_{nn} , 1/с, в сухой (слева) и влажной (справа) атмосфере

ядер конденсации, которые могут активироваться при более низких пересыщениях и, таким образом, изменить общую картину процесса. Разработанная модель в принципе позволяет провести такие расчеты.

В заключение можно еще раз высказать тезис, что численное моделирование каждого нового аварийного процесса или описание полномасштабного эксперимента обязательно требует большой подготовительной работы, а в результате — адаптации существующих методов и развития новых моделей. В данном случае потребовалась разработка и адаптация модели, основанной на совместном решении уравнений турбулентного движения многофазной многокомпонентной среды и кинетических уравнений конденсации/коагуляции композитных частиц.

Глава 10

АТМОСФЕРНЫЙ ПЕРЕНОС ПРИМЕСЕЙ

И в пространстве,
Ветреном и смелом,
Облако —
Из дальней дали гость —
Белым,
Будто выведенным мелом,
Знаком бесконечности
Неслось...

Н. Рубцов. Утро перед экзаменом

Разработка методов расчета процессов переноса примесей в атмосфере и их выпадения на местности, а также применение этих методов для прогноза последствий промышленных и аварийных выбросов, является необходимым элементом при выполнении прикладных работ в области безопасности и охраны окружающей среды. Применение гауссовых моделей (Метеорология и атомная энергия, 1971; Pasquill, 1975; Hanna and Paine, 1989; Козлов, 1991) удобно, но зачастую не дает ответа на вопрос как из-за эмпирического характера, так и из-за неясных рамок применимости этих моделей в нестандартных ситуациях.

Созданию более общих и одновременно достаточно экономичных методов расчета, позволяющих численно моделировать перенос и турбулентную диффузию газообразных и аэрозольных примесей в атмосфере, параметры которой зависят от высоты и времени, посвящены работы (Иванов, Пискунов, 1991; Иванов и др., 1994). За основу численного способа моделирования диффузионных процессов взят метод Монте-Карло. Результаты этих работ, а также модели динамических источников (Никонов, Пискунов, 1993; Гончаров и др., 1995), описанные в предыдущей главе, использованы для создания численной программы ПРОГНОЗ, одновременно описывающей формирование источников выброса и перенос аэрозольных примесей в атмосфере. Следует отметить, что программа ПРОГНОЗ занимает промежуточную «нишу» между гауссовыми методиками и сложными программными комплексами, рассчитывающими процессы формирования атмосферных

течений с учетом рельефа местности, тепловлагообмена и турбулентности, и, одновременно, моделирующими процесс атмосферной диффузии и переноса примесей (Алоян, 2008).

Работа по международным проектам (Piskunov et al., 1995a; Piskunov et al., 1995b; Piskunov, Aloyan, Marchuk et al., 1997b; Piskunov and Aloyan, 2002) позволила произвести дополнительную калибровку разработанных программ и применить их к задачам формирования, переноса и выпадения промышленных выбросов. В ходе этих работ был достигнут дальнейший прогресс в развитии физических моделей и их внедрении в сложные трехмерные математические комплексы, разрабатываемые ВНИИЭФ совместно с ИВМ РАН.

10.1. Моделирование процессов переноса и осаждения аэрозольных частиц методом Монте-Карло

В последнее время интенсивно развиваются численные методы решения задачи переноса аэрозолей в атмосфере как в лагранжевом (Сабельфельд, 1989), так и эйлеровом (Каргин, Цецохо, 1987; Борзилов и др., 1988; Ильин и др., 1993) подходах. В работе (Иванов, Пискунов, 1991) за основу взят подход, использующий полуэмпирическое уравнение турбулентной диффузии с векторными коэффициентами и параметрами атмосферы, зависящими от высоты. Для численного решения использован метод Монте-Карло, причем основное внимание уделено способу расчета плотности осаждения аэрозольных частиц на подстилающую поверхность. Факторизация решений, аналогичная (1.48), позволяет строить полное решение трехмерной задачи, моделируя только одномерный процесс диффузии по высоте z . Перейдем к изложению основных результатов подхода (Иванов, Пискунов, 1991).

Итак, в качестве базового уравнения возьмем трехмерное полуэмпирическое уравнение турбулентной диффузии

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_l} \left[K_{lm} \frac{\partial n}{\partial x_m} - V_l n \right] + Q(\mathbf{x}, r, t), \quad (10.1)$$

где по повторяющимся индексам подразумевается суммирование от 1 до 3; x_i — декартовы координаты; r — радиус частиц; $n(r, \mathbf{x}, t)$ — концентрация частиц радиусом r в точке $\mathbf{x}$ в момент времени t ; $K_{lm}(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{V}(\mathbf{x}, t)$ — коэффициенты турбулентной диффузии и скорость макроскопического движения частиц; $Q(\mathbf{x}, r, t)$ — источник частиц. Задача решается в полупространстве $z \equiv x_3 \geq 0$, т.е. подстилающая поверхность считается плоскостью $z = 0$.

В качестве начальных условий возьмем точечный мгновенный источник, расположенный на высоте H :

$$n_0(\mathbf{x}) = Q \delta(x_1) \delta(x_2) \delta(z - H). \quad (10.2)$$

Для формулировки граничных условий на подстилающей поверхности вводим поток частиц j вдоль оси z , с помощью которого граничные условия записываются в виде

$$j(\mathbf{x}, t) = K_{zi} \frac{\partial n}{\partial x_i} - V_z n, \quad j(x_1, x_2, 0, t) = \alpha n(x_1, x_2, 0, t), \quad (10.3)$$

где α имеет размерность скорости и характеризует поглощающие свойства поверхности (см. гл. 8). Отметим, что в величину V_z , кроме скорости переноса частицы направленными движениями, входит скорость осаждения частиц в поле тяжести $u_g(r)$, зависящая от размера частицы. В дальнейшем будем считать тензор диффузии K_{ij} диагональным: $K_{ij} = K_i \delta_{ij}$.

Для решения уравнения (10.1) с начальными и граничными условиями (10.2), (10.3) и параметрами K_i , $\mathbf{V}$, зависящими от высоты z , будем искать функцию $n(\mathbf{x}, t)$ в виде разложения по распределениям Гаусса:

$$n(\mathbf{x}, t) = \frac{Q}{4\pi} \int d\gamma d\beta \tilde{n}(z, t, \gamma, \beta) \prod_{i=1}^2 \beta_i^{-1/2} \exp \left[-\frac{(x_i - \gamma_i)^2}{4\beta_i} \right], \quad (10.4)$$

где $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2)$ и $\beta = (\beta_1, \beta_2)$ — параметры, меняющиеся в пределах: $\infty < \gamma_i < \infty$, $\beta_i \geq 0$. Подстановкой в (10.1) можно убедиться, что функция $\tilde{n}$ удовлетворяет уравнению

$$\partial_t \tilde{n} + V_i \frac{\partial \tilde{n}}{\partial \gamma_i} + K_i \frac{\partial \tilde{n}}{\partial \beta_i} = \partial_z \tilde{j}; \quad \tilde{j} = K_z \partial_z \tilde{n} - V_z \tilde{n} \quad (10.5)$$

с начально-краевыми условиями

$$\tilde{n}(z, 0, \gamma, \beta) = \delta(z - H) \delta(\gamma) \delta(\beta); \quad \tilde{n}(z, t, \gamma, \beta) = 0 \quad \text{при} \quad \beta_1 = 0$$

$$\text{или} \quad \beta_2 = 0; \quad \tilde{j}(0, t, \gamma, \beta) = \alpha \tilde{n}(0, t, \gamma, \beta).$$

В уравнении (10.5) диффузионным образом меняется только координата z , а фиктивные координаты частицы $\gamma(t)$ и $\beta(t)$ определяются как решения обыкновенных дифференциальных уравнений

$$d_t \gamma_i(t) = V_i[z(t)]; \quad d_t \beta_i(t) = K_i[z(t)]; \quad i = 1, 2, \quad (10.6)$$

где $z(t)$ — диффузионная траектория блуждания частицы по оси z . По существу, процесс численного решения (10.5) сводится к моделированию одномерных диффузионных траекторий $z(t)$. Плотность выпадений S находится интегрированием по t, γ, β :

$$S(x_1, x_2) = \int_0^\infty dt \int d\gamma d\beta \tilde{j}(0, t, \gamma, \beta) \varphi(x_1, x_2, \gamma, \beta), \quad (10.7)$$

где через φ обозначено произведение экспонент из (10.4) с множителем $Q/4\pi$. Из теории случайных процессов известно, что входящий в (10.7) поток $\tilde{j}$ имеет смысл плотности совместного распределения координат γ, β в момент гибели для частицы, находившейся при $t = 0$ в точке $z = H$. Отсюда вытекает следующая схема расчета величины S методом Монте-Карло. Моделируем траектории частиц и фиксируем значения величин γ и β в момент гибели. Значение S оценивается по формуле

$$S(x_1, x_2) = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \varphi(x_1, x_2, \gamma_k, \beta_k),$$

где L — число смоделированных траекторий. Нетрудно видеть, что в предложенной схеме каждая траектория позволяет оценить вклад сразу для всех интересующих нас точек поверхности, что существенно удешевляет расчеты по сравнению с прямым моделированием, не использующим (10.7).

Численный метод моделирования траекторий $z(t)$ основан на том (Иванов, Пискунов, 1991), что проводится разбиение полуоси $z \geq 0$ на отрезки, внутри которых K_i и $\mathbf{V}$ считаются постоянными, и используются аналитические решения уравнения диффузии со сложными начальными и граничными условиями. Отметим, что применение метода Монте-Карло позволяет автоматически избежать трудностей, связанных с так называемой «численной диффузией», характерной для разностных способов решения уравнений переноса (Boris and Book, 1973). Описанный метод был протестирован на следующих задачах, имеющих точные решения (Иванов, Пискунов, 1991).

Задача 1. Точечный мгновенный источник единичной мощности расположен на высоте $H = 100$ м и в точке с координатами $x = 0$, $x_2 = 0$. Компонента скорости $v = v_x = 10$ м/с, а компоненты $v_{2,3} = 0$. Коэффициенты диффузии $K_i = K = 35$ м²/с. Подстилающая поверхность абсолютно поглощающая, т. е. в формуле (10.3) $\alpha = \infty$. Аналитическое решение этой задачи имеет вид

$$S(x_1, x_2) = \frac{1 + 2\beta/\rho}{4\pi H^2 \rho^2 \beta} \exp\left(\frac{u_1 - \rho}{2\beta}\right), \quad (10.8)$$

где компоненты вектора $\mathbf{x}$ измеряются в единицах H ($u_1 = x/H$, $u_2 = x_2/H$, $u_3 = z/H$); $\rho = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 + 1}$, $\beta = K/(vH)$. В следующих задачах варьируется лишь один из основных параметров, остальные предполагаются прежними.

Задача 2. Вводится движение частиц в вертикальном направлении с постоянной скоростью. Аналитическое решение имеет вид

$$S(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{1 + \gamma^2}}{4\pi H^2 \rho^2 \beta} \left[1 + \frac{2\beta}{\rho \sqrt{1 + \gamma^2}} \right] \exp\left(\frac{u_1 + \gamma - \rho \sqrt{1 + \gamma^2}}{2\beta}\right), \quad (10.9)$$

где $\gamma = u_g/v$. В расчетах рассмотрено осаждение в поле тяжести со скоростью $u_g = 0,2$ м/с, т. е. $\gamma = 0,02$.

Задача 3. Скорость ветра v испытывает разрыв в точке $z = 150$ м, а именно $v = 50$ м/с при $z \leq 150$ м и $v = 10$ м/с при $z > 150$ м. Задача аналитического решения не имеет, но практически точными можно считать результаты расчетов по методу Монте-Карло.

Данные по плотности осаждения на оси следа $x_2 = 0$ для единичного источника приведены в табл. 10.1. При этом в регионе $-0,1 < x < 9,9$ км, $-1 < x_2 < 1$ км в задаче 1 оседает 0,705, в задаче 2 — 0,872, а в задаче 3 — 0,434 от полной массы выброса. Сравнение численных и аналитических результатов обнаружило (Иванов, Пискунов, 1991) достаточно высокую точность и эффективность предложенного алгоритма расчета плотности осаждения (при числе траекторий $I \sim 10^5$ различие наблюдается только в третьем знаке). Результаты табл. 10.1 могут использоваться для калибровки любых других новых методов расчета.

Таблица 10.1. Плотность осаждения $S(1/\text{м}^2)$
в задачах 1, 2, 3 на различных расстояниях

x , км	1	2	3
0	$1,520 \cdot 10^{-10}$	$2,018 \cdot 10^{-10}$	0
0,2	$1,609 \cdot 10^{-6}$	$2,128 \cdot 10^{-6}$	0
0,5	$2,154 \cdot 10^{-6}$	$2,826 \cdot 10^{-6}$	$1,707 \cdot 10^{-8}$
1	$1,112 \cdot 10^{-6}$	$1,438 \cdot 10^{-6}$	$3,294 \cdot 10^{-7}$
1,5	$6,281 \cdot 10^{-7}$	$8,009 \cdot 10^{-7}$	$5,259 \cdot 10^{-7}$
2	$3,982 \cdot 10^{-7}$	$5,005 \cdot 10^{-7}$	$5,173 \cdot 10^{-7}$
3	$1,994 \cdot 10^{-7}$	$2,435 \cdot 10^{-7}$	$3,421 \cdot 10^{-7}$
4	$1,190 \cdot 10^{-7}$	$1,413 \cdot 10^{-7}$	$2,782 \cdot 10^{-7}$
5	$7,892 \cdot 10^{-8}$	$9,105 \cdot 10^{-8}$	$2,533 \cdot 10^{-7}$
7	$4,193 \cdot 10^{-8}$	$4,569 \cdot 10^{-8}$	$1,688 \cdot 10^{-7}$
9,9	$2,160 \cdot 10^{-8}$	$2,166 \cdot 10^{-8}$	$8,751 \cdot 10^{-8}$

Отметим, что предложенный метод без особых изменений может быть использован и для явно зависящих от времени параметров, а также для протяженных источников. Возможно также обобщение на случай подстилающей поверхности с переменными коэффициентами поглощения $\alpha(x_1, x_2)$ и для расчета концентраций $n(\mathbf{x}, t)$. Но расчет переноса аэрозолей над местностью со сложным рельефом и скоростью ветра, зависящей от координат поверхности x_1, x_2 , вызывает в рамках этого метода принципиальные затруднения. В связи с этим можно порекомендовать более общий подход к описанию процессов

переноса аэрозолей в атмосфере, включающий в себя одновременно расчет газодинамических полей течения, определение параметров атмосферной турбулентности, решение уравнения турбулентной диффузии в трехмерных задачах со сложным рельефом местности и описание химических реакций в газовой фазе (Пененко, Алоян, 1985; Марчук, Алоян, 1989, Алоян, 2008).

10.2. Характеристики программы ПРОГНОЗ

Программа ПРОГНОЗ (Иванов и др., 1994) создана на основе факторизации решений уравнений переноса и опыта применения во ВНИИЭФ метода Монте-Карло (Иванов, Пискунов, 1991). Она позволяет численно моделировать перенос и турбулентную диффузию газобразных и аэрозольных примесей в атмосфере с заранее заданными и зависящими от высоты и времени характеристиками. Программа предназначена для расчетов плотности загрязнения местности и приземного слоя воздуха при промышленных и аварийных выбросах примесей в атмосферу и предусматривает возможность проведения расчетов от объемных источников выброса, модели которых описаны ранее. Существенным упрощающим предположением, используемым в программе, является постоянство поля атмосферных течений в плоскости x, y . Приведем некоторые конкретные характеристики программы ПРОГНОЗ.

Основные уравнения и упрощения. Для описания процессов распространения примесей в атмосфере в программе используется трехмерное полуэмпирическое уравнение турбулентной диффузии (10.1) с источниками Q , характеристики которых можно задавать способами, описанными далее. Подстилающая поверхность плоская, граничные условия задаются в форме (10.3).

В программе используются следующие предположения:

- тензор коэффициентов турбулентной диффузии диагонален в системе координат, связанной с подстилающей поверхностью: $K_{ij} = \delta_{ij} K_i$;

- поля скоростей $V_i(z, t)$ и коэффициентов диффузии $K_{lm}(z, t)$ считаются заданными и не зависящими от координат на подстилающей поверхности;

- скорости переноса V_1, V_2 и коэффициенты турбулентной диффузии K_i не зависят от размеров частиц.

Определение параметров переноса в атмосфере. В программе используется следующая эмпирическая зависимость для скорости седиментации $u_g(d)$ в нижних слоях атмосферы от размеров частиц d (Шифрин, 1958):

$$u_g = \frac{3,56 \cdot 10^{-5} \rho d^2}{1 + 2,54 \cdot 10^{-4} \sqrt{\rho d^3}}, \quad (10.10)$$

где u_g выражена в м/с; ρ — плотность частицы в г/см³; d — ее диаметр в мкм.

Для определения скоростей $V_i(z, t)$ и коэффициента диффузии $K_z(z, t)$ в первом варианте программы (Иванов и др., 1994) используется модель атмосферного пограничного слоя, описанная в работе (Бызова и др., 1987) и справочнике (Атмосфера, 1991). Эта модель позволяет восстановить профили $V_i(z, t)$ и $K_z(z, t)$ по интегральным характеристикам местности и затабулированным безразмерным зависимостям, составленным по результатам наблюдений на Обнинской высотной метеорологической мачте. В программе для восстановления профилей $V_i(z, t)$ и $K_z(z, t)$ требуется задать следующие величины: класс устойчивости атмосферы, время года, параметр шероховатости поверхности, характерную скорость на высоте 10 м и широту местности. Профиль компоненты скорости V_z определяется как сумма скорости седиментации $u_g(r)$ и скорости подъема источника $v_a(z, t)$. Коэффициенты горизонтальной диффузии в программе определяются по аппроксимационной формуле, построенной в работе (Gifford, 1982):

$$\sigma^2 = 2K_0t + \frac{v_0^2}{\beta^2} (1 - e^{-\beta t})^2 + \frac{K_0}{\beta} (4e^{-\beta t} - e^{-2\beta t} - 3),$$

где аналогом горизонтального коэффициента диффузии является величина $K = 0,5d_t\sigma^2$; t — время блуждания частицы; K_0 — коэффициент турбулентной диффузии в асимптотическом пределе $t \rightarrow \infty$; v_0 — параметр, имеющий размерность скорости; $\beta = t_L^{-1}$; t_L — временной масштаб переноса.

В качестве второго варианта в метеорологическом блоке программы ПРОГНОЗ также используется (Piskunov, Aloyan, Marchuk et al., 1997b) другая версия коэффициентов вертикальной и горизонтальной диффузии, которая заимствует параметризацию атмосферного пограничного слоя из модели ERAD, разработанной в (Boughton and DeLaurentis, 1992). В этой параметризации используются как обычные масштабы приземного слоя атмосферы (L — масштаб длины Монина-Обухова; $U_\bullet$ — масштаб скорости и $\theta_\bullet$ — масштаб потенциальной температуры), вычисляемые по результатам измерения скорости ветра и температуры, так и два дополнительных масштаба: высота слоя перемешивания h_B и конвективная скорость W_* , характеризующая турбулентный обмен в неустойчивых атмосферных условиях.

Характеристики источника. Задание интенсивности источника Q должно описывать пространственно-временное поведение источника выброса и дисперсный состав частиц (газообразные невесомые примеси считаем частным случаем частиц с нулевым размером). Самым простым случаем является случай точечного мгновенного выброса $Q = q\delta(t)\delta(x_1)\delta(x_2)\delta(z-h)$.

Облако импульсного выброса обычно представляет собой разогретую массу воздуха, которая увлекает за собой частицы выброса. В соответствии с этим в программе принято, что все частицы источника после импульсного выброса могут иметь составляющую v_a вертикальной скорости V_z , параметризуемую следующим образом:

$$v_a(z, t) = \frac{dz_c}{dt} \Phi\left(\frac{z}{z_c}\right); \quad \frac{dz_c}{dt} = v_0 \exp\left(-\frac{t}{t_0}\right), \quad (10.11)$$

где v_0 — начальная скорость подъема; t_0 — характерное время подъема облака; $x_c(t)$ — положение центра облака на момент времени t ; $\Phi(y)$ — универсальная функция переменной $y = z/z_c$, описывающая поле скоростей, возникающее при подъеме облака.

Вдоль каждой из координатных осей источник может характеризоваться одним из трех типов пространственного распределения частиц: δ -распределение: $F(x) = \delta(x - x_0)$, x_0 — координата источника; распределение Гаусса: $F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right)$, x_0 — координата источника, σ — дисперсия; равномерное распределение на отрезке $[x_0 - \Delta x, x_0 + \Delta x]$: x_0 — координата источника, Δx — полуширина распределения. Кроме того, можно задать объемное распределение частиц в виде сферы, эллипсоида или цилиндра.

Функция распределения частиц источника по размерам в программе может быть задана одним из следующих способов: δ -образное или сумма δ -образных распределений $f(r) = \sum_{i=1}^N f_i \delta(r - r_i)$; логнормальное распределение (1.2); равномерное распределение на отрезке $[r_1, r_2]$; нестандартное распределение, заданное гистограммой.

В настоящее время в программу введены (Piskunov, Aloyan, Marchuk et al., 1997b) динамические объемные источники (см. разделы 9.1, 9.2). При этом, как и ранее, источник описывается пространственно-временными характеристиками, дисперсным составом частиц выброса и степенью их поглощения подстилающей поверхностью. Кроме того, подъем облака (струи) учитывается заданием закона движения частиц, принадлежащих источнику.

Временная характеристика источника задается функцией мощности выброса $P(t)$, где P имеет размерность массы в единицу времени. В пределах времени действия источника, определяемого функцией мощности $P(t)$, его параметры могут зависеть от времени. К зависящим от времени параметрам источника относятся: дисперсный состав частиц выброса, плотность частиц выброса, степень их поглощения подстилающей поверхностью и пространственные параметры.

Для динамических объемных источников частицы не сразу попадают в атмосферные потоки, а вовлекаются в направленное и турбулентное движение газов источника. По моделям разделов 9.1, 9.2 рассчитывается траектория центра облака или оси струи, характерные

размеры облака или поперечного сечения струи, а также оценивается среднее время жизни частицы в источнике. Программой предоставляется возможность использования нескольких независимых или многокомпонентных (по загрязняющим примесям) источников. Данный подход позволяет более последовательно моделировать все стадии формирования объемных динамических источников и отказаться от использования эмпирической зависимости (10.11).

Поглощение примесей подстилающей поверхностью. Коэффициент поглощения (скорость «сухого» осаждения) α в (10.3) является важной характеристикой поверхности и одновременно зависит от физико-химических свойств частиц. Из общих соображений очевидны только следующие значения α : для абсолютно отражающей и абсолютно поглощающей поверхности $\alpha = 0$ и $\alpha = \infty$ соответственно. Одни из первых измерений значения α для паров радиоактивного йода были произведены в работе (Чемберлен, Чедвиг, 1962), где получены экспериментальные значения $\alpha_0 = 0,01-0,02$ м/с. Физические модели, позволяющие определять зависимость параметра α от скорости течений в приземном слое, параметра шероховатости и размеров частиц, описаны в гл. 8. В оценочных расчетах для аэрозолей часто используется аппроксимационная зависимость $\alpha = \alpha_0 + u_g$, где u_g — скорость седиментации, определяемая по формуле (10.10); для газов берется $\alpha = \alpha_0$.

Способ моделирования. Для численного решения уравнения (10.1) с граничными условиями (10.3) разработана эффективная численная схема метода Монте-Карло. Факторизация решений в виде (10.4) позволяет проводить вычисления путем моделирования одномерных по координате x_3 диффузионных траекторий $z(t)$. Траектории $z(t)$ моделируются по шагам Δt . Перед началом решения задачи область $z \geq 0$ разбивается на ячейки так, чтобы внутри их коэффициенты уравнения (10.1) были постоянными. При постоянных коэффициентах можно аналитически найти плотность распределения времени первого выхода частицы из ячейки. Эта плотность аппроксимируется достаточно простыми формулами и используется для розыгрыша шага Δt . Положение частицы в конце шага находится по вероятности ее выхода на определенную границу ячейки. При каждом попадании частицы на подстилающую поверхность запоминаются все параметры состояния частицы, необходимые для оценки методом Монте-Карло плотности выпадений S за время t :

$$S(x_1, x_2, t) = \int_0^t j(x_1, x_2, 0, \tau) d\tau. \quad (10.12)$$

После расчета заданного числа траекторий вычисляется плотность выпадения S , причем интегральное представление (10.4) позволяет определить ее в произвольной точке подстилающей поверхности. Объемная концентрация примесей в приземном слое $N(x_1, x_2, t)$ на время

t находится с использованием значения $j(x_1, x_2, 0, t)$ и граничного условия (10.3):

$$N(x_1, x_2, t) = j(x_1, x_2, 0, t)/\alpha.$$

В настоящее время разработан и оттестирован (Piskunov, Aloyan, Marchuk et al., 1997b) новый способ моделирования диффузионных траекторий частиц, использующий гладкую аппроксимацию коэффициентов уравнения (10.1) и позволяющий непосредственно вычислять приземные концентрации, не используя граничное условие (10.3).

Тестирование программы ПРОГНОЗ. В разд. 10.1 уже говорилось о результатах тестирования метода на задачах, имеющих точные решения (Иванов, Пискунов, 1991). Дальнейшее тестирование проводилось по результатам диффузионных экспериментов. На рабочей встрече специалистов по атмосферному переносу примесей в Roskilde (Olesen and Mikkelsen, 1992) для взаимного сравнения и тестирования региональных методик, описывающих перенос промышленных загрязнений, были выбраны результаты трех экспериментов с выбросом гексафторида серы: двух экспериментов, проведенных в Европе, и одного эксперимента в США. Описание постановки этих экспериментов и результаты измерений составляют основную часть банка данных «Model Validation Kit», предназначенного для тестирования численных методик. Приведем краткую характеристику опытов в районе электростанции в Kincaid, США (Hanna and Paine, 1989), которые выбраны для тестирования численных методик (местность вокруг электростанции представляет собой равнину с редкими озерами, характерная высота шероховатости равна ~ 10 см). Эксперименты заключались в непрерывном выбросе нагретого газа из трубы электростанции высотой 187 м и диаметром 9 м. В основном опыты проводились при нейтральных и неустойчивых атмосферных условиях. В файле метеорологической информации содержатся осредненные за час данные по профилям ветра и температуры в слое высотой 100 м и осредненные за час результаты радиозондовых измерений профилей температуры, давления и скорости, полученные около 6 часов утра и около 18 часов вечера по местному времени. Приводятся также экспериментальные значения высоты слоя перемешивания. Для тестирования региональных методик прогноза предложены данные по осредненной за час приземной концентрации гексафторида серы, зарегистрированной детекторами, которые размещались по дугам окружности на дистанции от 0,5 км до 50 км от источника. Максимальные на дуге окружности концентрации газа надежно измерены в 21 серии опытов (338 величин), причем в двух опытах измерено только по одному значению концентрации.

Эксперименты, проведенные в районе электростанции Kincaid (США), были использованы для тестирования программы ПРОГНОЗ. Расчеты по программе ПРОГНОЗ (Харченко и др., 2001) проведены для 19 серий опытов, что позволило сравнить с экспериментальными данными 336 расчетных значений максимальных объемных

концентраций гексафторида серы на различных дистанциях от точки выброса. Варианты расчетов с параметризацией пограничного слоя по модели ERAD обнаружили лучшее согласие с экспериментом. В целом программа ПРОГНОЗ позволяет рассчитывать загрязнение приземного слоя при выбросе нагретого газа из высокой трубы примерно с такой же точностью, как одна из лучших европейских методик OML (Olesen, 1995).

Подчеркнем, что программа ПРОГНОЗ не претендует на детальный характер описания явлений мезомасштабного переноса, поскольку поле атмосферных течений в ней не рассчитывается, а задается по результатам измерений или расчетов по сложным трехмерным газодинамическим программам. Комплексные модели и пакеты программ, позволяющие рассчитывать поля атмосферных течений с учетом теплового переноса и рельефа местности, а также одновременно решать уравнения турбулентной диффузии, описаны в работах (Пененко, Алоян, 1985; Марчук, Алоян, 1989; Алоян, 2008).

10.3. Сочетание экспериментального и теоретического подходов в проблеме прогнозирования

Для дальнейшего изложения важно понять, каким образом должны применяться описанные выше способы моделирования для прогноза последствий промышленных и аварийных выбросов и какова цель подобного прогноза. В основном мы будем говорить (Пискунов, 2003) о прогнозе, позволяющем рассчитать судьбу выбросов РВ в окружающую среду в результате тяжелых запроектных гипотетических аварий и дающем основу для оценки экономического ущерба, который эти выбросы могут нанести. Фактически основной целью такого прогноза является стремление объективно оценить и уменьшить опасность гипотетических аварий, действуя на профессиональном уровне.

Часто задают резонный вопрос: зачем вообще заниматься моделированием и прогнозом последствий аварий: ведь расчеты, проведенные до гипотетической аварии, ненадежны — слишком много неучтенных и случайных факторов; а прогнозирование после аварии кажется бессмысленным — проще измерить реальные параметры загрязнений, чем заниматься предсказаниями!? Ответ очень прост: для того, чтобы управлять, нужно знать! Детальное знание основных процессов, происходящих во время аварии, позволяет разработать меры по снижению ее последствий. Например, могут помочь такие способы: окружение потенциально опасных объектов демпфирующими слоями, заполнение объемов пеной, организация капельных завес и другие приемы, позволяющие снизить действие ударной волны или теплового воздействия, а также осадить вредные аэрозоли в непосредственной окрестности аварии. А определить эффективность этих мер проще всего расчетным образом (либо на лабораторных моделях). Кроме того, результаты

прогноза должны служить для оценки возможного экономического ущерба, наносимого авариями. Результаты такой оценки должны лежать в основе административных решений, позволяющих избежать лишнего риска и затрат. Например, могут быть приняты решения по дополнительному техническому оснащению аварийных формирований, ограничению сельскохозяйственной деятельности, отселению или эвакуации населения и т. д. Следует подчеркнуть, что в основном речь идет именно о гипотетических авариях, поскольку задача прогнозирования по своему смыслу должна быть предупреждающей, служащей недопущению аварий в действительности.

Среди всего многообразия возможных аварийных ситуаций наибольшую опасность для окружающей среды и населения представляют собой именно аварии, сопровождающиеся выбросами вредных веществ в атмосферу. Во-первых, процессы переноса загрязнений в атмосфере настолько динамичны, что последствия таких выбросов сказываются практически сразу. Во-вторых, при выбросах в атмосферу загрязняется приземный слой воздуха и подстилающая поверхность (почва, водоемы, растительность), что приводит к непосредственному загрязнению окружающей среды и представляет собой прямую угрозу для поступления вредных веществ в организм человека и животных.

Мы не будем заниматься сравнительным анализом степени опасности объектов атомной энергетики и ядерного оружия (ЯО), но подчеркнем, что за все шестидесятилетнее время в России (Советском Союзе) не было ни одного инцидента с ЯО, во время которого произошло бы диспергирование и выброс радиоактивных веществ в окружающую среду! Этот факт обусловлен повышенным вниманием отрасли к проблемам безопасности ЯО и пониманием того, что заниматься данными проблемами — значит осознавать реальную меру ответственности, а вовсе не подчеркивать реальную опасность ЯО. Нам представляется, что именно неполное осознание меры ответственности администрации ЧАЭС за технические операции привели к Чернобыльской катастрофе, и это лишний раз подчеркивает, что проблеме безопасности в атомной отрасли нужно придавать высший приоритет и постоянно работать над этой проблемой!

Детальный анализ аварийных процессов должен предусматривать разработку сценариев различных инцидентов на потенциально опасных объектах. Например, это может быть либо внешнее неагламентированное воздействие (стихийное бедствие, падение самолета, диверсионные действия), либо внутреннее разрушение контайнмента при взрыве гремучей смеси с выбросом паров РВ, либо процессы длительного горения внутри разрушенного контайнмента и т. д. Если добавить сюда гипотетические аварии с ЯО, то этот перечень сильно расширится. Ясно, что наличие такого широкого круга сценариев с различными исходами не всегда позволяет создать фундаментальные и инженерные методы моделирования и прогноза последствий аварий, применимые для любого инцидента с выбросом РВ. Здесь на помощь приходит

сочетание экспериментального и теоретического подходов: можно экспериментально исследовать наиболее типичные ситуации, откалибровать на них расчетные методики, а затем расширить области их применения со сравнением результатов в единичных полномасштабных экспериментах.

Естественно, что прямые эксперименты с выбросом РВ в атмосферу в настоящее время невозможны, даже если будут приняты все необходимые меры по обеспечению экологической безопасности и доказана их эффективность. Некоторые данные по имевшим место крупным инцидентам с диспергированием РВ содержатся в (Кабакчи и Путилов, 1995; Лысцов и др., 1993; Кузьмина и Токаревский, 1997). В имевших место авариях с выбросом РВ редко удавалось надежно определить параметры источника, атмосферы и местности на момент аварии, а также измерить динамику распространения и общую картину загрязнений. Все это делает чрезвычайно актуальным сравнение проведенных ранее методических экспериментов с результатами расчетов и соответствующую калибровку численных методик на начальном этапе работ. На заключительном (зачетном) этапе работ целесообразным является проведение полномасштабных экспериментов (с обеспечением экологической безопасности и применением имитаторов вредных веществ), во время которых выполняется максимально полный объем измерений. По результатам этих опытов проводится дальнейшая калибровка методов расчета. В качестве примера таких работ следует назвать проведение ВНИИЭФ в 1997 г. серии полномасштабных диффузионных экспериментов (описание экспериментов см. в следующем разделе) по проблемам безопасности на внешнем специализированном полигоне, где были промоделированы некоторые аварийные ситуации, определены характеристики частиц и плотности их выпадений вплоть до десятка километров, экспериментально измерены параметры атмосферы. Экологическая безопасность опытов была обеспечена применением имитаторов РВ. Окончательная обработка и анализ результатов были выполнены путем сочетания расчетных и экспериментальных данных.

Из предыдущего рассмотрения видно, насколько важна роль теоретического (математического) моделирования в задачах безопасности и в проблеме прогнозирования последствий различного рода аварий. Для объективности мы не можем не привести и скептические высказывания на эту тему. Например, в книге известного специалиста по динамическому моделированию в экологии (Скорер, 1980) высказано следующее мнение (правда, конкретно речь идет об упрощенных эмпирических способах расчета — гауссовых моделях):

— Многие исследователи не дают себе отчет в том, что легче просто измерить распределение загрязняющих веществ, чем сначала измерять турбулентные характеристики движения воздуха и только потом прогнозировать распределение загрязняющих веществ на основе некоторой теории.

Несмотря на большой авторитет Р. Скорера, блестящего специалиста-экспериментатора, а также человека очень оригинального и обладающего хорошим чувством юмора, вряд ли можно полностью согласиться с этим мнением, в особенности, если речь идет о прогнозе последствий для залповых и аварийных выбросов. Вести регулярный мониторинг для такого рода задач просто невозможно, а ответственность за принимаемые решения чрезвычайно велика, чтобы позволить себе дожидаться тщательного анализа результатов измерений. Именно поэтому важно знать общую ожидаемую картину и возможные последствия крупных инцидентов заранее, поскольку в многофакторный экспресс-анализ результатов по измерениям параметров загрязнения местности и приземного слоя воздуха зачастую просто невозможен. Отметим также, что применимость теоретических моделей прогноза, основанных на фундаментальном подходе, Р. Скорером конечно же не подвергается сомнению.

Следует подчеркнуть важность международного сотрудничества в работах по безопасности. По своей сути проблемы аварийного и промышленного воздействия на окружающую среду являются общими для всего человечества, и обмен информацией в этом направлении одинаково служит на пользу для всех участников такого обмена. В этом мы убедились на собственном опыте, когда во время работ по международным проектам (Piskunov et al., 1995a; Piskunov et al., 1995b; Piskunov, Aloyan, Marchuk et al., 1997b; Piskunov and Aloyan, 2002) мы активно взаимодействовали со специалистами США, Дании, Англии. Результаты работ, выполняемых по данной тематике, постоянно докладывались на Европейских аэрозольных конференциях (Гамбург, 1997; Прага, 1999; Дублин, 2000; Тайпей, 2002; Мадрид, 2003; Будапешт, 2004) и вызвали значительный интерес, что свидетельствует о важности этого направления для международного сообщества.

10.4. Диффузионные эксперименты ВНИИЭФ

Одним из приоритетных направлений в решении вопросов обеспечения безопасности ЯО является исследование процессов рассеяния делящихся материалов в натурных экспериментах с использованием имитаторов РВ. Эти работы необходимы для определения реальной опасности гипотетических аварий, для оценки эффективности защитных средств и конструкционных способов повышения безопасности ЯО. Реальные масштабы радиоактивного загрязнения местности имеют определяющее значение для принятия решений по радиационной защите персонала и населения, для выбора способов ликвидации последствий и для разработки технических мер снижения тяжести аварий. Ниже представлены результаты экспериментов ВНИИЭФ 1997 г., изложенные в статье (Михайлов и др., 2003).

Известно, что после Чернобыльской аварии сформировалось резко отрицательное отношение средств массовой информации и общест-

венности к любым потенциальным источникам радиационных аварий, в особенности к различным видам ядерного оружия, которое с обычной точки зрения традиционно считается наиболее опасным. Постараемся объективно разобраться в этой проблеме, не касаясь по естественным причинам деталей конструкции современных ядерных устройств и перечня реальных мер, принимаемых для обеспечения их безопасности.

Коротко остановимся на критериях оценки опасности радиационной аварии. Сразу отметим, что после аварии на ЧАЭС для оценки последствий аварий с ЯО использовались слишком жесткие критерии. Зоной отселения была определена местность с плотностью загрязнения плутонием $0,1 \text{ Ки/км}^2$ (статья 9 Закона РФ от 15 мая 1991 г. № 1244-1 «О социальной защите граждан, подвергшихся воздействию радиации вследствие катастрофы на Чернобыльской АЭС»). Результаты численного моделирования гипотетических аварий с ядерными устройствами давали при таких критериях значительные размеры зоны аварии. Длина зоны отселения при аварии с одиночным устройством составляла сотни километров.

К настоящему времени сформированы более объективные критерии оценки опасности радиационных аварий. Для них критерии устанавливаются органами Госсанэпиднадзора применительно к конкретному радиационно-опасному объекту с учетом вероятных типов аварии. Гигиенические нормативы, учитывающие только радиологический аспект аварии, внедрены в виде «Критериев для принятия решений по радиационной защите населения при аварийном диспергировании ^{239}Pu ...».

В целом новыми нормами радиационной безопасности (НРБ-99) предусматривается снижение допустимых норм облучения. При этом оказалось, что корректный пересчет к допустимым уровням поверхностного загрязнения, для аэрозолей аварийного взрыва, содержащих плутоний, дал значительное уменьшение производных уровней вмешательства. Критерий для зоны временного перемещения населения составил $5,5 \text{ Ки/км}^2$, а зоной радиационной аварии (радиационного контроля) определена зона с загрязнением больше, чем $0,23 \text{ Ки/км}^2$. Главной причиной этого являются слишком большие запасы, заложенные в критериях предложенных после Чернобыльской катастрофы.

В наибольшей мере выработке объективного отношения к безопасности ЯО способствуют прямые диффузионные эксперименты с выбросом РВ и их имитаторов в атмосферу. Первыми экспериментами такого рода были опыты, результаты которых обобщены в диссертации Б. И. Огнева. В дальнейшем в течение 1980–1990-х годов на внутренних площадках ВНИИЭФ и ВНИИТФ проводились целевые эксперименты, в которых исследовались процессы формирования аэрозольного источника загрязняющих примесей при взрывном нагружении макетов. Использовались только имитаторы РВ, в экспериментах проверены меры, повышающие экологическую безопасность опытов подобного рода. В площадочных опытах параметры загрязнения местности определя-

лись на небольших расстояниях — примерно до 100 м. Наиболее полная и детальная информация по проблемам безопасности была получена при проведении ВНИИЭФ в 1997 г. на внешнем специализированном полигоне уже упоминавшейся серии полномасштабных диффузионных экспериментов по проблемам безопасности. Ряд измерений в этих экспериментах был выполнен привлеченными организациями различных ведомств.

Цели экспериментов. Проведение полномасштабных экологически безопасных экспериментов, во время которых выполняется максимально полный объем измерений, является чрезвычайно сложной задачей. Редакция опытов 1997 г. предусматривала исследование наиболее часто рассматриваемых видов и режимов гипотетических аварий и включала в себя 4 эксперимента с взрывами макетов и 2 эксперимента, имитирующих аварии с пожарами. Часть взрывных опытов проведена в составе наиболее распространенных защитных средств (контейнеров). Во всех экспериментах РВ и вредные вещества заменены на экологически и радиационно-безопасные материалы.

В процессе проведения опытов измерялись параметры пограничного слоя атмосферы (НПО «Тайфун»). Были определены характеристики аэрозольных частиц и плотности их выпадения вплоть до десятка километров. Окончательный анализ результатов был выполнен путем сочетания расчетных и экспериментальных данных.

Целью работ являлось:

- определение реальных масштабов загрязнения местности при гипотетических авариях с ЯО.

- проверка способов и средств повышения безопасности ЯО.

- поиск и отработка материалов, заменяющих РВ при моделировании.

- развитие экспериментальных методик отбора и анализа проб, калибровка расчетных способов моделирования переноса и диффузии загрязнений.

В опытах проводилась киносъемка процессов формирования и подъема облака взрыва и струи пожара, производились измерения осколков в окрестности точки взрыва. Для измерения параметров загрязнения местности использовались следующие методы:

- расстановка планшетной сети;

- отбор проб с помощью импакторов и воздуходувок;

- отбор проб из облака взрыва и струи пожара с помощью самолета-лаборатории (МО);

- отбор проб из газодымовой струи на термоосадитель.

Анализ результатов метеорологических измерений показал, что эксперименты проведены в основном при устойчивой и нейтральной стратификации пограничного слоя атмосферы. В период 1997–1999 гг. во ВНИИЭФ и других организациях проведена интенсивная работа по подготовке и физико-химическому анализу отобранных проб. Общая организация работ, как и анализ результатов, лежали на теоретиках.

Фильтровые пробы и пробы с каскадов импакторов анализировались методами, разработанными специалистами ВНИИЭФ: радиометрическим, спектрофотометрическим, экстракционно-люминесцентным, масс-спектрометрическим, рентгенофлуоресцентным, гамма-спектрометрическим. Пробы, отобранные на термоосадитель, анализировались методом просвечивающей электронной микроскопии в лаборатории физики аэрозолей НИИФ СПбГУ. Для определения дисперсного состава аэрозолей с фильтров самолета-лаборатории содержание имитатора РВ во фракциях, выделенных путем принудительной седиментации на центрифуге, измерялось организациями МО РФ двумя независимыми аналитическими методами — методом атомно-эмиссионной спектроскопии и масс-спектрометрическим методом.

Основные результаты. Данные по весовому балансу остатков макета на пожарном стенде показывают, что при горении в интенсивном внешнем пожаре, с плавлением имитатора РВ, в условиях эксперимента в атмосферу уносится в виде аэрозолей примерно 4,7 % материала имитатора. Исследование аэрозольных частиц, отобранных из газодымовой струи, показывает, что частицы окислов сорбируются хлопьями сажи, образуя рыхлые фрактальные частицы с характерными размерами $\sim 1,7$ мкм. По результатам измерений импакторами и воздухоудками, в спектре помимо частиц респираторной фракции (с аэродинамическими диаметрами менее 10 мкм) представлены также крупные частицы с характерным аэродинамическим диаметром ~ 100 мкм. Доля респираторных частиц в спектре равна ~ 12 %.

Остаток конструкционных материалов в очаге пожара состоит из интерметаллических соединений имитатора с материалом оболочки, а также из порошка окислов. Данные по химическому и дисперсному анализу остатков конструкционных материалов в очаге пожара получены и полезны для определения регламента работ по ликвидации последствий аварий с горением РВ, а также для дальнейшей обработки имитаторов РВ.

В пожарном опыте исследовалась одна из наиболее неблагоприятных аварийных ситуаций в интенсивном внешнем пожаре. Анализ показал, что значимые уровни загрязнения достигаются до расстояний 2 км. В поперечном к следу направлению распределение плотности выпадения по углу на расстоянии ≤ 50 м аппроксимируется гауссовым распределением, на расстоянии 100 м гауссово приближение работает плохо, а далее выпадения нерегулярны и наблюдаются в угловом секторе 180° .

Анализ экспериментальных данных показал, что аварии с пожаром носят локальный характер (временное перемещение населения необходимо проводить из зоны протяженностью $L = 0,3$ км). Для взрывных опытов распределение массы имитатора РВ по размерам оказалось близким к логнормальному распределению с массовым медианным аэродинамическим диаметром $d_m = 18$ мкм и стандартным геометри-

ческим отклонением $\sigma = 2,2$. Следует отметить следующие экспериментальные данные, полученные во взрывных опытах, и результаты численного моделирования:

1. Во взрывных опытах значимые уровни загрязнения достигаются вплоть до измерительной позиции на расстоянии 5 км. Экспериментальные распределения плотности выпадения по углу во всех взрывных опытах хорошо описываются гауссовыми зависимостями.

2. Численное моделирование по методике ПРОГНОЗ показывает, что расчетные результаты для максимальной и интегральной по углу плотности загрязнения хорошо согласуются с полученными экспериментальными данными при параметрах спектра частиц в облаке взрыва, найденных путем применения процедуры минимизации, описанной в (Пискунов и др., 2005).

3. На основе экспериментальных данных, результатов расчетов и новых критериев по производным уровням вмешательства определены реальные масштабы последствий аварий с ядерными устройствами при различных режимах аварий. Аварии с одиночным устройством на открытой местности не приводят к последствиям глобального масштаба, а представляют опасность только для близлежащего региона (временное перемещение населения необходимо вплоть до расстояния порядка 5 км).

В целом подобные эксперименты целесообразно продолжить для решения новой технической задачи — отработки средств подавления и локализации выбросов вредных веществ.

10.5. Некоторые результаты моделирования

Моделирование взрывных экспериментов. В (Piskunov et al., 1995a) проведено моделирование взрывных опытов серии Roller Coaster (Luna et al., 1971; Boughton and DeLaurentis, 1992). Результаты расчетов по динамике всплывания облака (Гончаров и др., 1995) использовались далее для расчетов по программе ПРОГНОЗ. Для учета полей течений, возникающих при движении облака взрыва, применялась формула (10.11) для вертикальной скорости подъема v_a . Универсальная функция $\Phi(y)$ переменной $y = z/z_c$ выбрана следующей:

$$\Phi(y) = \sqrt{y} \quad \text{при } y < 1, \quad \Phi(y) = \exp(1 - y^2) \quad \text{при } y > 1.$$

Расчеты плотностей выпадения проведены для двух опытов: Double Tracks и Clean Slate-1. Для них получены следующие параметры динамики подъема облака: $v_0 = 4,36$ м/с, $t_0 = 47,9$ с и $v_0 = 6,79$ м/с, $t_0 = 58,6$ с соответственно. Спектры частиц в источнике и параметры переноса примесей в атмосфере заданы в соответствии с экспериментальными данными (Luna et al., 1971). При этом учитывались профили и разворот скорости ветра по высоте; параметры турбулентной диффузии взяты по модели АПС (Атмосфера, 1991). Представляет

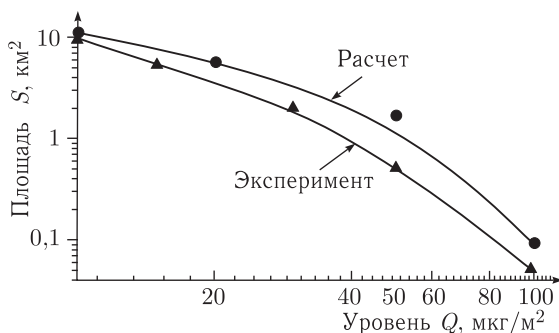


Рис. 10.1. Площади S с плотностью загрязнения выше заданного уровня Q в опыте «Double Tracks»

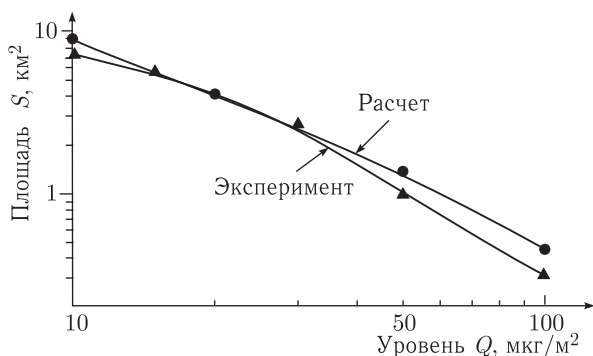


Рис. 10.2. Площади S с плотностью загрязнения выше заданного уровня Q в опыте «Clean Slate-1»

интерес сравнить результаты, полученные в (Piskunov et al., 1995a), с экспериментальными данными, представленными в более поздней публикации (Boughton and DeLaurentis, 1992).

На рисунках 10.1 и 10.2. приведено сравнение расчетных и экспериментальных данных по площадям S , ограничиваемым некоторыми заданными уровнями загрязнения Q . Видно, что для опыта Double Tracks отличие около двух раз наблюдается на расстояниях до 1 км (уровни загрязнений $Q \sim 50\text{--}100$ мкг/м²), далее отличие не превышает 30%. Для опыта Clean Slate-1 хорошее совпадение наблюдается на всех расстояниях. По профилям выпадений на оси следа можно сделать аналогичные выводы. Кроме того, расчетные значения несколько превышают экспериментальные данные, что и должно выполняться в соответствии с основными принципами прогнозирования.

Моделирование процессов мезомасштабного переноса. Международный проект «Математическое моделирование процессов мезомасштабного переноса атмосферных загрязнений с учетом их трансформа-

ции» выполнялся ВНИИЭФ совместно с ИВМ РАН (Piskunov, Aloyan, Marchuk et al., 1997b) и был посвящен созданию методов расчета переноса загрязнений в атмосфере и выпадения на местности с учетом изменения их состава, теплового баланса на подстилающей поверхности, реальных метеоусловий и характеристик местности. Наряду с описанными выше моделями во ВНИИЭФ были разработаны программные 2D–3D-комплексы TREK, SRP и усовершенствованы 2D–3D-модели ИВМ РАН. Для верификации методов расчета был сформулирован ряд модельных задач, отражающих основные проблемы формирования и переноса атмосферных загрязнений, а также проанализированы полномасштабные эксперименты, данные которых можно использовать при проверке методик.

Задача о ВУРС. Выполнено моделирование так называемого Восточно-Уральского радиоактивного следа (Кабакчи и Путилов, 1995). Постановка задачи взята из работы (Авраменко и др., 1994). В начальный момент времени на высоте 700 м задается источник загрязнений в виде 20 фракций дисперсной примеси. Состав примесей по массе и размерам частиц примерно соответствует имевшему место при аварии. Заданы характерные для этой местности атмосферные течения и коэффициенты турбулентной диффузии.

Проведено два расчета, в которых варьировались способы задания коэффициентов диффузии и седиментации. Результаты расчетов по комплексу TREK сравниваются с данными наблюдений и результатами расчета по методике, использующей метод частиц. Получено удовлетворительное согласие результатов наших расчетов с ранее полученными результатами. На рис. 10.3 приведена карта загрязнения местности, полученная в расчетах по комплексу TREK.

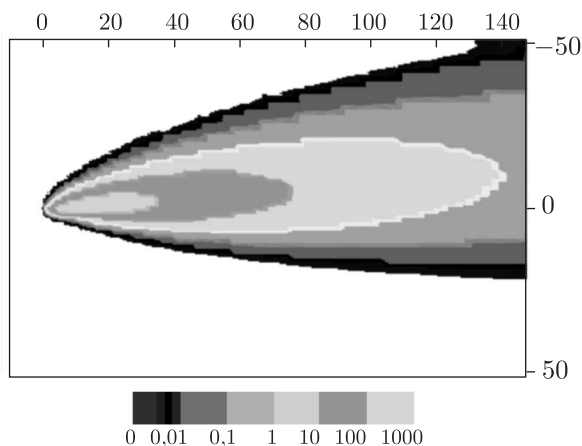


Рис. 10.3. Распределение активности ($\text{Ки}/\text{км}^2$) на подстилающей поверхности (размеры в км)

Эксперименты Ямады. В серии экспериментов (Yamada et al., 1989) изучались воздушные течения и исследовался перенос гексафторида серы в условиях сложной орографии. Из восьми опытов результаты двух были выбраны для тестирования разрабатываемых трехмерных численных методик. Первый эксперимент был проведен в устойчивых атмосферных условиях. Выброс проводился в течение 1 ч, начиная с 22 часов по местному времени, со скоростью ~ 50 г/с. Источник выброса располагался на высоте 1,5 м над поверхностью земли. Второй опыт был проведен в неустойчивых атмосферных условиях. Параметры источника не изменялись, а выброс газа выполнялся с 10 часов утра.

В период проведения опытов с помощью зондов получены усредненные по периоду 40–55 мин профили ветра, температуры и отношения смеси (количества пара, приходящегося на килограмм сухого воздуха). В ряде пунктов на местности получены усредненные за час скорости ветра на высоте 10 м. В опытах измерялись средние за час концентрации газа. В ночных условиях в течение 7 ч после окончания выброса детекторы регистрировали концентрации SF_6 , превышающие фоновые значения (~ 10 ppt). В дневном эксперименте концентрации газа уменьшились до фоновых величин через 3 ч после завершения выброса. Следует отметить, что исходная информация является неполной для проведения численных экспериментов, поскольку не приведены данные о подстилающей поверхности и теплофизических характеристиках почв.

По трехмерному комплексу SRP выполнен расчет переноса примесей в ночном эксперименте, проведенном 3 августа в условиях устойчивой атмосферы. Расчет проведен для территории размером 70×70 км с подробным описанием рельефа местности. Получены подробные пространственные картины поля скоростей и данные по распределению концентраций примеси в атмосфере и на поверхности. Имеется качественное согласие с результатами измерений и расчетами (Yamada et al., 1989).

Для расчетов по моделям ИВМ РАН был выбран дневной эксперимент, проведенный 7 августа 1987 г. Сопоставление результатов расчетов с данными наблюдений показало, что модель ИВМ РАН хорошо согласуется с данными измерений, приведенных в (Yamada et al., 1989). Расчеты показали, что модель применима для описания полей атмосферных течений и динамики распространения примеси над местностью со сложным рельефом.

Эксперименты по переносу трития. В первой серии опытов (CEA, 1986) в южном пригороде Парижа исследовался перенос трития на дистанции порядка 4 км. В опытах, проведенных на местности с простой орографией (гладкая подстилающая поверхность, содержащая парковые насаждения и сеть дорог), измерялась концентрация трития в приземном слое воздуха. Результаты эксперимента, проведенного

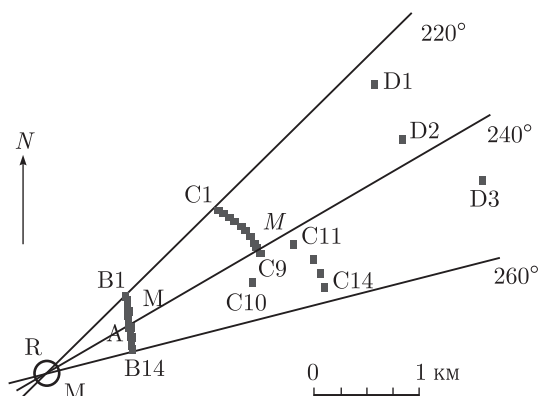


Рис. 10.4. Расположение измерительных точек в эксперименте CAE (М — метеорологическая башня; А, В, С, D — точки пробоотбора; R — точка выброса)

15 октября, были выбраны для тестирования гауссовой инженерной методики и методики ПРОГНОЗ.

Схема эксперимента показана на рис. 10.4. Для измерения концентрации трития использовались 32 камеры пузырькового типа, которые располагались на высоте $\sim 1,45$ м над уровнем земли. Одна камера находилась в пункте А, удаленном на ~ 800 м от точки выброса. 14 камер размещались вдоль линии В, примерно в 1000 м от источника. Также 14 камер были установлены вдоль линии С на дистанции ~ 2500 м от источника трития. И, наконец, 3 камеры находились на удалении ~ 4300 м от источника. В первые полчаса после выброса регистрируется в основном активность трития из проходящего облака, в последующем в измеряемую активность вносит вклад обратная эмиссия трития из грунта.

Выброс проводился из трубы высотой 40 м (высота дополнительного всплывания агретого газа — 9 м). Время начала выброса — 13 ч 12 мин по местному времени, а его длительность — 2 мин. В выбросе в основном представлен газ НТ (0,7 г трития).

Анализ поверхностного загрязнения почвы тритием показал, что поглощенный тритий находится в слое глубиной ~ 5 см. Скорость осаждения трития рассчитывалась как частное от деления интегрального поверхностного загрязнения на интегральное значение концентрации газа в воздухе. Вблизи пункта А средняя скорость сухого осаждения оказалась равной $2,2 \cdot 10^{-4}$ м/с. На линии В скорость осаждения изменялась от $1,7 \cdot 10^{-4}$ м/с до $3,6 \cdot 10^{-4}$ м/с.

Во время проведения эксперимента стояла ясная погода, атмосферное давление воздуха равнялось 1014 мбар. Метеорологические измерения проводились на трех башнях: главная метеорологическая башня находилась вблизи источника, а две дополнительные — вблизи

точек размещения камер В8 и С9. Измерения направления ветра на высотах 40 и 70 м показывают, что в течении 30 мин после выброса ветер с высотой либо поворачивает влево, либо совсем не поворачивает, в то время как в северном полушарии над горизонтально однородной поверхностью ветер обычно поворачивает с высотой вправо. Анализ результатов метеорологических измерений показывает, что состояние устойчивости атмосферы можно характеризовать как неустойчивое (класс В по классификации Пасквилла, как принято в работе (СЕА, 1986)).

В работах (Piskunov et al, 1995b; Piskunov, Aloyan, Marchuk et al., 1997b) проводилось сравнение результатов расчетного моделирования с экспериментальными данными — моделировался атмосферный перенос трития в воздухе, кинетика преобразования трития в тритиевую воду не рассматривалась.

Расчеты проводились по методике ПРОГНОЗ и по гауссовой методике. При численном моделировании переноса трития принималось неустойчивое состояние атмосферы (класс В по классификации Пасквилла) и не учитывался поворот ветра с высотой. Конкретно в расчетах по гауссовой методике задан ветер со скоростью 2 м/с в направлении 240° , а вертикальные и поперечные дисперсии оценивались по формулам Бриггса. В расчетах по методике ПРОГНОЗ для профилей коэффициентов турбулентности и модуля скорости ветра использовались типовые данные из работы (Бызова и др., 1987). При моделировании по обеим методикам принималось, что скорость сухого осаждения равна $2,2 \cdot 10^{-4}$ м/с.

На рис. 10.5 сравниваются усредненные за полчаса приземные объемные концентрация трития вдоль оси следа, рассчитанные по гауссовой методике и по методике ПРОГНОЗ. На рисунках 10.6 и 10.7 приводится сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными

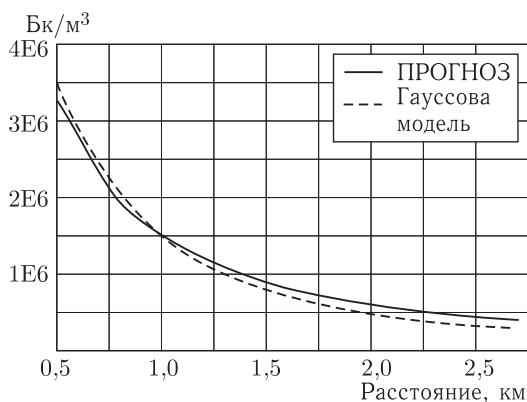


Рис. 10.5. Вариация приземной концентрации трития с расстоянием от источника

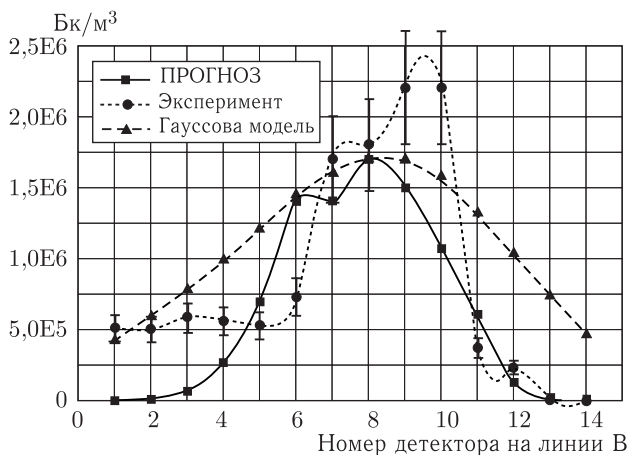


Рис. 10.6. Сравнение расчетных и измеренных концентраций трития вдоль линии В

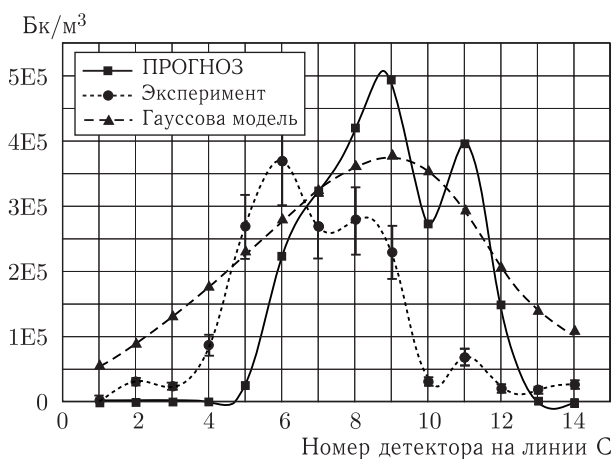


Рис. 10.7. Сравнение расчетных и измеренных концентраций трития вдоль линии С

по приземной концентрации трития вдоль линий В и С, ориентированных по направлению, близкому к перпендикулярному относительно направления следа.

Расчеты по гауссовой модели рассеяния струи и по методике ПРОГНОЗ дают совпадающие значения приземной концентрации на оси следа в районе линии В (детектор В8) и различаются на $\sim 30\%$ на линии С (детектор С9).

В целом расчеты по методике ПРОГНОЗ дают меньшую ширину следа, что согласуется с измерениями, и с хорошей точностью пред-

сказывают максимальную концентрацию на конкретном удалении от источника. В то же время расчеты по гауссовой методике в ~ 2 раза завышают ширину следа. Связано это, по-видимому, с тем, что величина поперечной дисперсии в гауссовой модели параметризуется по результатам экспериментов с длительно действующим источником, когда в процесс диффузии вовлекаются турбулентные вихри больших масштабов.

Кроме того, в рамках международного проекта проведены численные эксперименты по аэрозольному загрязнению региона оз. Байкал с учетом кинетических процессов конденсации (Марчук и др., 1996; Piskunov and Aloyan, 2002). Исследована пространственно-временная картина распространения и динамики изменения спектров частиц. На базе этой модели рассчитаны характеристики окисления SO_2 в атмосфере Европейского региона. Численные расчеты позволили выделить потенциальные зоны региона, ответственные за формирование кислотных осадков.

Приведенные в гл. 7, 9, 10 примеры расчетов далеко не исчерпывают все многообразие динамических задач, в которых важны аэрозоли и в которых могут применяться описанные выше модели кинетики. Большое число практических примеров и расчетов приведено в монографии (Алоян, 2008), посвященной разработке математических моделей для решения задач переноса многокомпонентных газовых примесей и аэрозолей в атмосфере в региональном и глобальном масштабах.

По мнению автора, данная монография и книга (Алоян, 2008) хорошо сочетаются друг с другом и решают одну и ту же проблему — динамики примесей в атмосфере — с различных, но взаимодополняющих точек зрения.

Список литературы

- Авраменко М. И., Андреев Е. С., Васильев А. П. и др. (1994). Методики и программы для расчета распространения полидисперсной примеси в атмосфере // ВАНТ. Сер. «Математическое моделирование физических процессов». 1994. Вып. 1. С. 26–31.
- Алоян А. Е. (2008). Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. — М.: Наука, 2008.
- Амелин А. Г. (1972). Теоретические основы образования тумана при конденсации пара. — М.: Химия, 1972.
- Анисимов Ю. Г., Пискунов В. Н. (1990). Кинетика коагуляции в разлетающемся облаке космозолей // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 1990. Вып. 1. С. 20–22.
- Арсеньев С. А., Ильин В. О., Шелковников Н. К., Егоров Ю. А. (1993). Прогнозирование газоаэрозольных выбросов АС // Атомная энергия. 1993. Т. 74, вып. 3. С. 217–223.
- Атмосфера. (1991). Справочник (справочные данные, модели). — Л.: Гидрометеоиздат, 1991.
- Борзилов В. А., Вельтищева Н. С., Клепикова Н. В. и др. (1988). Региональная модель переноса полидисперсной примеси // Метеорология и гидрология. 1988. № 4. С. 56–65.
- Бызова Н. Л., Шнайдман В. А., Бондаренко В. Н. (1987). О восстановлении вертикальных профилей характеристик пограничного слоя атмосферы по ограниченной метеорологической информации // Метеорология и гидрология. 1987. № 11. С. 75–83.
- Бялко А. В. (1989). Наша планета — Земля. — М.: Наука, 1989.
- Владимиров А. М., Ляхин Ю. И., Матвеев Л. Т., Орлов В. Г. (1991). Охрана окружающей среды. — Л.: Гидрометеоиздат, 1991.
- Волощук В. М. (1983). Стационарные распределения коагулирующего атмосферного аэрозоля // Метеорология и гидрология. 1983. № 10. С. 21–28.
- Волощук В. М. (1984). Кинетическая теория коагуляции. — Л.: Гидрометеоиздат, 1984.
- Волощук В. М., Седунов Ю. С. (1975). Процессы коагуляции в дисперсных системах. — Л.: Гидрометеоиздат, 1975.
- Вольнский М. С. (1986). Необыкновенная жизнь обыкновенной капли. — М.: Знание, 1986.
- Вульфсон Н. И., Лактионов А. Г., Скацкий В. И. (1973). Структура кучевых облаков на различных стадиях развития // Изв. АН СССР. Сер. «Физика атмосферы и океана». 1973. Т. IX, № 5. С. 500–509.
- Гайнуллин К. Г., Затевахин М. А., Пискунов В. Н., Голубев А. И., Исмаилова Н. А., Довгало Ю. А. (2003). Численное моделирование кинетики формирования спектра капель в кучевых облаках // Изв. РАН. Сер. «Физика атмосферы и океана». 2003. Т. 39, № 1. С. 74–84.
- Гегузин Я. Е. (1977). Капля. — М.: Наука, 1977.

- Гегузин Я. Е., Кривоглаз М. А. (1971). Движение макроскопических включений в твердых телах. — М.: Металлургия, 1971.
- Головин А. М. (1963). К вопросу о решении уравнения коагуляции дождевых капель с учетом конденсации // Докл. АН СССР. 1963. Т. 148, № 6. С. 1290–1293.
- Голубев А. И., Пискунов В. Н., Повышев В. М. (1991). Моделирование кинетики объемной конденсации // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 1991. Вып. 2. С. 1–9.
- Гончаров Е. А., Пискунов В. Н., Харченко А. И., Мартин Ф. Дж., Черч Х. У. (1995). Модель, описывающая динамику подъема облака неядерного взрыва // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 1995. Вып. 3/1. С. 59–68.
- Гостинцев Ю. А., Копылов Н. П., Рыжов А. М., Хасанов И. Р. (1990). Конвективный перенос продуктов сгорания в атмосфере над большими пожарами // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1990. № 4. С. 47–52.
- Гостинцев Ю. А., Рыжов А. М. (1994). Численное моделирование динамики пламен, огненных вихрей и штормов при пожарах на открытых пространствах // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 1994. № 6. С. 52–61.
- Грин Х., Лейн В. (1972). Аэрозоли — пыли, дымы и туманы. — Л.: Химия, 1972.
- Деннис А. (1980). Изменение погоды засевом облаков. — М.: Мир, 1980.
- Домиловский Е. Р., Лушников А. А., Пискунов В. Н. (1978). Моделирование процессов коагуляции методом Монте-Карло // Докл. АН СССР. 1978. Т. 240, № 1. С. 108–110.
- Домиловский Е. Р., Лушников А. А., Пискунов В. Н. (1979). Моделирование процессов коагуляции методом Монте-Карло // Изв. АН СССР. Сер. «Физика атмосферы и океана». 1979. Т. 15, № 2. С. 194–201.
- Домиловский Е. Р., Лушников А. А., Пискунов В. Н. (1980). Стационарные распределения частиц по размерам в конечных коагулирующих системах с распадами // Прикладная математика и механика. 1980. Т. 44, вып. 4. С. 697–701.
- Емец Е. П., Новоселова А. Э., Полуэктов П. П. (1994). *In situ*-определение фрактальной размерности аэрозольных частиц // УФН. 1994. Т. 164, № 9. С. 959–966.
- Жуланов Ю. А., Никитин О. Н., Сапрыкин К. Г. и др. (1983). Лазерный счетчик аэрозольных частиц // Приборы и техника эксперимента. 1983. № 3. С. 177–180.
- Загайнов В. А., Лушников А. А., Осидзе И. Г., Смидович К. П. (1988). Численное моделирование кинетики коагуляции в смешанном облаке // Изв. АН СССР. Сер. «Физика атмосферы и океана». 1988. Т. 24, № 6. С. 622–627.
- Зайчик Л. И., Алипченков В. М. (2007). Статистические модели движения частиц в турбулентной жидкости. — М.: Физматлит, 2007.
- Затевахин М. А. (2001). Турбулентный термик во влажной атмосфере // Теплофизика высоких температур. 2001. Т. 39, № 4. С. 573–580.
- Затевахин М. А., Пискунов В. Н. (2004). Численное моделирование динамики формирования аэрозольных частиц при больших пожарах // Доклад на V Минском междунар. форуме по тепломассообмену, Минск, Беларусь, май 2004 г.

- Зельдович Я. Б. (1942). К теории образования новой фазы. Кавитация // ЖЭТФ. 1942. Т. 12, вып. 11. С. 525–538.
- Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. (1966). Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: Наука, 1966.
- Иванов Н. В., Пискунов В. Н. (1991). Моделирование процессов переноса и осаждения аэрозольных частиц методом Монте-Карло // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Математическое моделирование физических процессов». 1991. Вып. 2. С. 73–78.
- Иванов Н. В., Никонов С. Н., Пискунов В. Н. (1994). Методика расчета переноса и осаждения аэрозольных выбросов в атмосферу // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Математическое моделирование физических процессов». 1994. Вып. 3. С. 21–25.
- Исихара А. (1973). Статистическая физика. — М.: Мир, 1973.
- Кабакчи С. А., Путилов А. В. (1995). Анализ данных и физико-химическое моделирование радиационной аварии на Южном Урале в 1957 году // Атомная энергия. 1995. Т. 78, вып. 1. С. 46–50.
- Каргин Б. А., Цецохо С. В. (1987). Статистическое моделирование переноса аэрозолей в приземном слое атмосферы // Численные методы статистического моделирования. 1987. С. 181–192.
- Кароль И. Л. (1972). Радиоактивные изотопы и глобальный перенос в атмосфере. — Л.: Гидрометеиздат, 1972.
- Кароль И. Л., Затевахин М. А., Ожигина Н. А. и др. (2000). Численная модель динамических, микрофизических и фотохимических процессов в конвективном облаке // Изв. АН. ФАО. 2000. Т. 36, № 6. С. 1–16.
- Карташев А. П., Рождественский Б. Л. (1976). Обыкновенные дифференциальные уравнения и основы вариационного исчисления. — М.: Наука, 1976.
- Качурин Л. Г., Морачевский В. Г. (1965). Кинетика фазовых переходов воды в атмосфере. — Л.: ЛГУ, 1965.
- Кейдл Р. (1969). Твердые частицы в атмосфере и в космосе. — М.: Мир, 1969.
- Кикоин А. К., Кикоин И. К. (1976). Молекулярная физика. — М.: Наука, 1976.
- Киффер С. В. (1986). Динамика и термодинамика вулканических извержений: Султаны выбросов на Ио // Спутники Юпитера. — М.: Мир, 1986. — С. 20–106.
- Козлов В. Ф. (1991). Справочник по радиационной безопасности. — М.: Энергоатомиздат, 1991.
- Красилов Г. А., Тер-Сааков А. А. (1971). Молекулярно-кинетическая модель формирования радиоактивных частиц при наземных ядерных взрывах // Атомная энергия. 1971. Т. 31, вып. 6. С. 581–584.
- Кузьмина И. Е., Токаревский В. В. (1997). Источники и механизмы формирования аэрозолей в объекте «Укрытие» // Атомная энергия. 1997. Т. 82, вып. 1. С. 130–136.
- Куни Ф. М. (1988). Кинетическая теория конденсации в динамических условиях // Проблемы теоретической физики. — Л.: ЛГУ, 1988. — С. 192–236.
- Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. (1973). Методы теории функций комплексного переменного. — М.: Наука, 1973.
- Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. (1988). Гидродинамика. — М.: Наука, 1988.

- Левич В. Г. (1959). Физико-химическая гидродинамика. — М.: Физматгиз, 1959.
- Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. (1979). Физическая кинетика. — М.: Наука, 1979.
- Лифшиц И. М., Слезов В. В. (1958). О кинетике диффузионного распада пересыщенных твердых растворов // ЖЭТФ. 1958. Т. 35, вып. 2. С. 479–492.
- Логинов В. И., Лапица Е. Я. (1978). Определение моментов решения кинетического уравнения агрегирования частиц // Докл. АН СССР. 1978. Т. 243, № 1. С. 145–148.
- Лушников А. А. (1973). Об асимптотическом виде распределения частиц по размерам в коагулирующих системах // Докл. АН СССР. 1973. Т. 210, № 5. С. 1130–1133.
- Лушников А. А. (1977). К теории коагуляции бинарных смесей // Докл. АН СССР. 1977. Т. 234, № 1. С. 97–100.
- Лушников А. А. (1978). Некоторые новые аспекты теории коагуляции // Изв. АН СССР. Сер. «Физика атмосферы и океана». 1978. Т. 14, № 10. С. 1046–1054.
- Лушников А. А., Пискунов В. Н. (1976а). Стационарная коагуляция в пространственно-неоднородных системах, находящихся во внешнем однородном поле // Докл. АН СССР. 1976. Т. 228, № 3. С. 642–644.
- Лушников А. А., Пискунов В. Н. (1976б). Сингулярные асимптотические распределения в коагулирующих системах // Докл. АН СССР. 1976. Т. 231, № 5. С. 1166–1169.
- Лушников А. А., Пискунов В. Н. (1976в). Коагуляция в присутствии внешних источников // Докл. АН СССР. 1976. Т. 231, № 6. С. 1403–1406.
- Лушников А. А., Пискунов В. Н. (1977). Асимптотические режимы коагуляции в системах с внешним источником частиц // Коллоидный журнал. 1977. Т. 39, № 6. С. 1076–1080.
- Лушников А. А., Пискунов В. Н. (1978). Автомодельные сингулярные спектры масс частиц в коагулирующих системах // Коллоидный журнал. 1978. Т. 40, № 3. С. 475–482.
- Лушников А. А., Пискунов В. Н. (1982). Три новые точно решаемые модели в теории коагуляции // Докл. АН СССР. 1982. Т. 267, № 1. С. 132–136.
- Лушников А. А., Пискунов В. Н. (1983). Аналитические решения в теории коагулирующих систем со стоками // Прикладная математика и механика. 1983. Т. 47, вып. 6. С. 931–939.
- Лушников А. А., Пискунов В. Н. (1984). Стационарные режимы коагуляции в системах с мгновенным дроблением частиц // Коллоидный журнал. 1984. Т. 46, № 2. С. 272–278.
- Лушников А. А., Токарь Я. И. (1978). Коагуляция частиц в вакууме // Докл. АН СССР. 1978. Т. 241, № 3. С. 620–622.
- Лушников А. А., Токарь Я. И. (1980). Гамма-приближение для асимптотических спектров в коагулирующих системах // Коллоидный журнал. 1980. Т. 42, № 3. С. 570–574.
- Лушников А. А., Токарь Я. И., Цицкишвили М. С. (1981). Две точно решаемых модели коагулирующих систем с источником частиц // Докл. АН СССР. 1981. Т. 256, № 5. С. 1155–1158.

- Лушников А. А., Осидзе И. Г., Пискунов В. Н. (1984). Влияние стоков на коагуляционный спектр в системах с источниками // Коллоидный журнал. 1984. Т. 46, № 5. С. 909–916.
- Лушников А. А., Пискунов В. Н., Осидзе И. Г. (1986). Коагуляция в системах с периодическим источником // Докл. АН СССР. 1986. Т. 287, № 3. С. 679–682.
- Лысцов В. Н., Иванов А. Б., Колышкин А. Е. (1993). Радиоэкологические аспекты аварии в Томске // Атомная энергия. 1993. Т. 74, вып. 4. С. 364–367.
- Мазин И. П., Шмистер С. М. (1983). Облака, строение и физика образования. — Л.: Гидрометеиздат, 1983.
- Мак-Картни Э. (1979). Оптика атмосферы. Рассеяние света молекулами и частицами. — М.: Мир, 1979.
- Марчук Г. И. (1988). Методы расщепления. — М.: Наука, 1988.
- Марчук Г. И., Алоян А. Е. (1989). Математическое моделирование в задачах экологии. Препринт № 234. — М.: ОВМ АН СССР, 1989.
- Марчук Г. И., Алоян А. Е., Лушников А. А., Загайнов В. А., Макаренко С. В. (1990). Математическое моделирование переноса аэрозолей в атмосфере с учетом коагуляции. Препринт № 237. — М.: ОВМ АН СССР, 1990.
- Марчук Г. И., Алоян А. Е., Пискунов В. Н., Егоров В. Д. (1996). Распространение примесей в атмосфере с учетом конденсации // Изв. АН, ФАО. 1996. Т. 32, № 5. С. 745–752.
- Мейсон Б. Дж. (1961). Физика облаков. — Л.: Гидрометеиздат, 1961.
- Мещерский И. В. (1952). Работы по механике тел переменной массы. — М.: Гостехтеориздат, 1952.
- Метеорология и атомная энергия. (1971). — Л.: Гидрометеиздат, 1971.
- Михайлов В. Н., Трутнев Ю. А., Пискунов В. Н., Харченко А. И. (2003). Диффузионные эксперименты как один из важнейших элементов работ по безопасности // Теоретики ВНИИЭФ. Прошлое и настоящее. — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2003. — С. 20–23.
- Монин А. С., Яглом А. М. (1965). Статистическая гидромеханика. Ч. 1. Механика турбулентности. — М.: Наука, 1965.
- Московченко А. В., Гладков С. О. (1993) Динамика химического состава аэрозолей в условиях коагуляции // Докл. РАН. 1993. Т. 328, № 3. С. 325–329.
- Музафаров И. Ф., Утюжников С. В. (1995). Численное моделирование конвективных колонок над большим пожаром в атмосфере // Теплофизика высоких температур. 1995. Т. 33, № 4. С. 594–601.
- Никонов С. Н., Пискунов В. Н. (1993). Модели формирования объемных источников выброса в атмосферу // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 1993. Вып. 3. С. 23–26.
- Пененко В. Н., Алоян А. Е. (1985). Модели и методы для задач охраны окружающей среды. — Новосибирск: Наука, 1985.
- Петрянов-Соколов И. В., Сутугин А. Г. (1989). Аэрозоли. — М.: Наука, 1989.
- Пискунов В. Н. (1984). Асимптотические закономерности диффузионного роста частиц новой фазы // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 1984. Вып. 1. С. 24–30.

Пискунов В. Н. (1985а). Дисперсные системы с коагуляцией и дроблением частиц // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 1985. Вып. 1. С. 42–54.

Пискунов В. Н. (1985б). Стационарные спектры частиц в дисперсных системах с коагуляцией и распадом // Прикладная математика и механика. 1985. Т. 49, вып. 6. С. 1035–1039.

Пискунов В. Н. (1986а) Коагуляция в системах с внешним источником частиц. Ч. 1: Системы со стационарным источником // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 1986. Вып. 1. С. 29–38.

Пискунов В. Н. (1986б). Коагуляция в системах с внешним источником частиц. Ч. 2: Системы с источником переменной интенсивности и системы с источником и стоком // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 1986. Вып. 2. С. 46–56.

Пискунов В. Н. (1986в). Численные и аналитические решения кинетического уравнения коагуляции со стоками // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 1986. Вып. 3. С. 27–37.

Пискунов В. Н. (1987). Роль процессов коагуляции в формировании спектров частиц в дисперсных системах. Дис.... докт. физ.-мат. наук. — М.: ИПГ им. Федорова, 1987.

Пискунов В. Н. (1991). Физические процессы в дисперсных системах. — М.: МИФИ, 1991.

Пискунов В. Н. (1996). О кинетике коагуляции композитных частиц // Докл. РАН. 1996. Т. 350, № 1. С. 70–73.

Пискунов В. Н., Голубев А. И., Гончаров Е. А., Исмаилова Н. А. (1996). Новая модель кинетики коагуляции композитных частиц // ВАНТ. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 1996. Вып. 3. С. 12–30.

Пискунов В. Н., Голубев А. И. (1999). Метод определения динамических параметров коагулирующих систем // Докл. РАН. 1999. Т. 366, № 3. С. 341–344.

Пискунов В. Н. (2000). Теоретические модели кинетики формирования аэрозолей. — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2000.

Пискунов В. Н. (2003). Экология, безопасность, прогнозирование // Атом. 2003. № 22. С. 7–12.

Пискунов В. Н. (2004). Моделирование динамических процессов в аэродисперсных системах. — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2000.

Пискунов В. Н. (2004а). Моделирование кинетики формирования частиц в дисперсных системах на основе интегрального подхода // Докл. РАН. 2004. Т. 397, № 1. С. 52–56.

Пискунов В. Н., Голубев А. И., Гончаров Е. А., Исмаилова Н. А. (1996). Новая модель кинетики коагуляции композитных частиц // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 1996. Вып. 3. С. 12–30.

Пискунов В. Н., Голубев А. И., Исмаилова Н. А. (2000а) Применение обобщенных функций для аппроксимации решений кинетического уравнения коагуляции. Ч. 1: Обоснование и реализация GA-метода // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 2001. Вып. 2–3. С. 23–31.

Пискунов В. Н., Голубев А. И., Исмаилова Н. А. (2000б) Применение обобщенных функций для аппроксимации решений кинетического уравнения коагуляции. Ч. 2: Проверка эффективности и сравнение с другими методами // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 2001. Вып. 2–3. С. 32–42.

Пискунов В. Н., Петров А. М., Голубев А. И. (2001) Модели кинетики формирования частиц с учетом фазовых переходов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 2001. Вып. 3. С. 22–33.

Пискунов В. Н., Камаев Д. А., Клепикова Н. В., Семенов В. Н., Sugiyama G. (2005) Методы решения задачи о восстановлении источников выброса по результатам измерений параметров загрязнений // Аннот. докладов международной конференции «Аэрозоли и безопасность-2005». — Обнинск, 2005. — С. 47.

Прессман А. Я. (1959). Роль турбулентного рассеяния по вертикали при осаждении неоднородных примесей из атмосферы // Инженерно-физический журнал. 1959. Т. 11, № 11. С. 11–19.

Райст П. (1987). Аэрозоли. Введение в теорию. — М.: Мир, 1987.

Райзер Ю. П. (1959). О конденсации в облаке испаренного вещества, расширяющегося в пустоту // ЖЭТФ. 1959. Т. 37, вып. 6. С. 1741–1750.

Рампино М. Р., Селф С. (1984). Извержение Эль-Чичона и его воздействие на атмосферу Земли // В мире науки. 1984. № 3. С. 16–27.

Сабельфельд К. К. (1989). Методы Монте-Карло в краевых задачах. — Новосибирск: Наука, 1989.

Сафронов В. С. (1962). Частный случай решения уравнения коагуляции // Докл. АН СССР. 1962. Т. 147, № 1. С. 64–67.

Сафронов В. С. (1969). Эволюция допланетного облака и образование Земли и планет. — М.: Наука, 1969.

Седов Л. И. (1967). Методы подобия и размерности в механике. — М.: Наука, 1967.

Сергеев Б. Н. (1977). Об универсальных распределениях частиц аэрозоля по размерам, формирующихся в процессе стационарной коагуляции // Докл. АН СССР. 1977. Т. 237, № 6. С. 1322–1325.

Скорер Р. (1980). Аэрогидродинамика окружающей среды. — М.: Мир, 1980.

Слезов В. В., Сагалович В. В. (1987). Диффузионный распад твердых растворов // УФН. 1987. Т. 151, вып. 1. С. 67–104.

Смирнов В. И., Сергеев Б. Н. (1980). «Псевдостепенные» решения кинетических уравнений и интерпретация некоторых спектров размеров частиц атмосферного аэрозоля, облачных и дождевых капель // Изв. АН СССР. Сер. «Физика атмосферы и океана». 1980. Т. 16, № 12. С. 1310–1312.

Спурный К., Йех Ч., Седлачек Б., Шторх О. (1964). Аэрозоли. — М.: Атомиздат, 1964.

Стыро Б. И. (1968). Самоочищение атмосферы от радиоактивных загрязнений. — Л.: Гидрометеоиздат, 1968.

Сутугин А. Г., Токарь Я. И. (1985). Образование конденсационных аэрозолей в пространственно неоднородной системе // Коллоидный журнал. 1985. Т. 47, № 2. С. 341–347.

- Теворовский Е. Н., Дмитриев Е. С. (1988). Перенос аэрозольных частиц турбулентными потоками. — М.: Энергоатомиздат, 1988.
- Тернер Дж. (1977). Эффекты плавучести в жидкостях. — М.: Мир, 1977.
- Тихонов А. Н., Самарский А. А. (1966). Уравнения математической физики. — М.: Наука, 1966.
- Тодес О. М. (1949). Кинетика коагуляции и укрупнения частиц в золях. Проблемы кинетики и катализа. — М.: Изд-во АН СССР, 1949. — С. 137–173.
- Френкель Я. И. (1975). Кинетическая теория жидкостей. — Л.: Наука, 1975.
- Фролов Ю. Г. (1989). Курс коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы. — М.: Химия, 1989.
- Фукс Н. А. (1958). Испарение и рост капель в газообразной среде. — М.: Изд-во АН СССР, 1958.
- Фукс Н. А. (1961). Успехи механики аэрозолей. — М.: Изд-во АН СССР, 1961.
- Харченко А. И., Никонов С. Н., Олесен Х. Р., Пискунов В. Н. (2001). Тестирование методики ПРОГНОЗ по результатам диффузионных опытов, входящих в базу данных Model Validation Kit // ВАНТ. Сер. «Теоретическая и прикладная физика». 2001. Вып. 2. С. 41–48.
- Хргиан А. Х. (1986). Физика атмосферы. — М.: МГУ, 1986.
- Чандрасекар С. (1947). Стохастические проблемы в физике и астрономии. — М.: Изд-во иностр. лит., 1947.
- Чемберлен А. С., Чедвиг Р. С. (1962). Перенос йода из атмосферы на землю. Исследования по ядерной метеорологии и химия атмосферы. — Л.: Гидрометеоиздат, 1962.
- Шифрин К. С. (1958). Универсальная формула для скорости падения шара в жидкости // Изв. АН СССР. Сер. географическая. 1958. № 2. С. 280–282.
- Экологические последствия ядерной войны (1988). Т. 1. Физические и атмосферные эффекты. — М.: Мир, 1988.
- Эрнст М. (1988). Кинетика образования кластеров при необратимой агрегации. Фракталы в физике. — М.: Мир, 1988. — С. 399–429.
- Юнге Х. (1965). Химический состав и радиоактивность атмосферы. — М.: Мир, 1965.
- Aloyan A. E., Egorov V. D., Marchuk G. I., Piskunov V. N. (1992). Aerosol formation mathematical modelling with consideration for condensation kinetics // Rus. J. Num. Anal. Math. Modelling. 1992. V. 7, No. 6. P. 457.
- Barrett J. C., Webb N. A. (1998). A comparison of some approximate methods for solving the aerosol general dynamic equation // J. Aerosol Sci. 1998. V. 29. P. 31–39.
- Barroudy E. M. (1967). Calculations on the collisional coalescence of gas bubbles in solids // J. Appl. Phys. 1967. V. 38, No. 12. P. 4893.
- Berry E. X., Reinhardt R. L. (1974). An analysis of cloud drop growth by collection // J. Atm. Sci. 1974. V. 31, No. 7. P. 1814.
- Boris J. P., Book D. L. (1973). Flux-corrected transport I: SHASTA, A fluid transport algorithm that works // J. Comp. Phys. 1973. V. 11, No. 1. P. 38.

Boughton B. A., DeLaurentis J. M. (1992). Description and validation of ERAD: An atmospheric dispersion model for high explosive detonation. Sandia Report SAND92-2069.

CEA Institut de protection et de surete nucleaire department de protection technique. (1986). Environmental tritium behaviour. French experiment. Final report. Ref. 85-07-R1.

Chen F., Yu S. C. M., Lai A. C. K. (2006). Modeling particle distribution and deposition in indoor environments with a new drift-flux model // *Atmospheric Environment*. 2006. V. 40. P. 357–367.

Cotton T. L. (1972). Numerical simulation of precipitation development in super-cooled cumuli. Part II // *Mon. Wea. Rev.* 1972. V. 100. P. 764–784.

Davies C. N. (1966). Deposition of aerosols from turbulent flow through pipes // *Proc. of Royal Soc. A*. 1966. V. 289. P. 235–246.

Dougalyuk Yu. A., Zatevakhin M. A., Stankova E. N. (1994). Numerical simulation of a buoyant thermal using the $k - \varepsilon$ turbulence model // *J. Applied Meteorology*. 1994. V. 33, No. 9. P. 1118–1126.

Dye J. E. et al. (1986). Early electrification and precipitation development in a small, isolated Montana Cumulonimbus // *J. Geophys. Res.* 1986. V. 91, No. D1. P. 1231–1237.

Fan F., Ahmadi G. (1993). A sublayer model for turbulent deposition of particles in vertical ducts with smooth and rough surfaces // *J. Aerosol Sci.* 1993. V. 24. P. 45–64.

Fletcher N. H. (1962). The physics of rain clouds. Cambridge: University Press, 1962.

Fox R. O. (2006) Bivariate direct quadrature method of moments for coagulation and sintering of particle populations // *J. Aerosol Sci.* 2006. V. 37. P. 1562–1580.

Friedlander S. K. (1960). Similarity considerations for the particle size spectrum of a coagulating, sedimenting aerosol // *J. Meteorol.* 1960. V. 17. P. 479.

Friedlander S. K., Wang C. S. (1966). The self-preserving particle size distribution for coagulation by Brownian motion // *J. Col. Sci.* 1966. V. 22. P. 126–132.

Gao N. P., Niu J. L. (2007). Modeling particle dispersion and deposition in indoor environments // *Atmospheric Environment*. 2007. V. 41. P. 3862–3876.

Gardiner B., Lamb D., Pitter R. L., Hallet J. (1985). Measurements of initial potential gradient and particle Charges in a Montana summer thunderstorm // *J. Geophys. Res.* 1985. V. 90, No. D4. P. 6079–6086.

Gifford F. A. (1982). Horizontal diffusion in the atmosphere: A. Lagrangian-dynamical theory // *Atmos. Environment*. 1982. V. 16, No. 3. P. 505.

Golubev A. I., Piskunov V. N., Ismailova N. A. (1999). «AERFORM» code for numerical simulation of aerosol formation kinetics // *J. Aerosol Sci.* 1999. V. 30. P. S231–S232.

Goncharov E. A. (1996). Kinematics of the coagulation processes and problems in temperature-different condensation. The second meeting of the participants and European collaborators of the Project № 47, Roskilde, Denmark, December 1996.

Guha A. (1997). A unified eulerian theory of turbulent deposition to smooth and rough surfaces // *J. Aerosol Sci.* 1997. V. 28. P. 1517–1537.

- Hanna S. R., Paine R. J.* (1989). Hybrid plume dispersion model (HPDM) development and evaluation // *J. Applied Meteorology*. 1989. V. 28. P. 206–224.
- Hidy J. M., Brock J. R.* (1970). The dynamics of aerocolloidal systems. — Oxford: Pergamon-Press, 1970.
- Hussein T., Hruska A., Dohányosová P., Dzumbová L., Hemerka J., Kulmala M., Smolik J.* (2009). Deposition rates on smooth surfaces and coagulation of aerosol particles inside a test chamber // *Atmospheric Environment*. 2009. V. 43. P. 905–914.
- Johansen S. T.* (1991). The deposition of particles on vertical walls // *Intern. J. Multiphase Flow*. 1991. V. 17. P. 355–376.
- Jonsson L., Karlsson E., Jönsson P.* (2008). Aspects of particulate dry deposition in the urban environment // *J. of Hazardous Materials*. 2008. V. 153. P. 229–243.
- Kharchenko A. I.* (1997). Parametrization of dry deposition velocity in the atmospheric surface layer // *J. Aerosol Sci.* 1997. V. 28. Suppl. 1. P. 589.
- Kosovic B., Sugiyama G., Chow T. K. et al.* (2005). Dynamic Data-Driven Event Reconstruction for Atmospheric Releases // Аннот. докл. междунар. конференции «Аэрозоли и безопасность-2005», Обнинск, Россия, 2005. С. 46.
- Lai A. C. K., Nazaroff W. W.* (2000). Modeling indoor particle deposition from turbulent flow onto smooth surfaces // *J. Aerosol Sci.* 2000. V. 31. P. 463–476.
- Lai A. C. K., Nazaroff W. W.* (2005). Supermicron particle deposition from turbulent chamber flow onto smooth and rough vertical surfaces // *Atmospheric Environment*. 2005. V. 39. P. 4893–4900.
- Lai F. S., Friedlander S. K., Pich J., Hidy J. M.* (1972). The self-preserving particle size distribution for Brownian coagulation in the free-molecule regime // *J. Col. and Interface Sci.* 1972. V. 39. P. 395–405.
- Leyvraz F., Tschudi H. R.* (1980). An exactly solvable model for externally controlled coagulation // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1980. V. 13. P. 1867.
- Liu B. Y. H., Agarwal J. K.* (1974). Experimental observation of aerosol deposition in turbulent flow // *J. Aerosol Sci.* 1974. V. 5. P. 145–155.
- Loyalka L. S.* (1983). Mechanics of aerosole in nuclear reactor safety: A review // *Progress in Nuclear Energy*. 1983. V. 12, No. 1. P. 1.
- Luna R. E., Church H. W., Shreve J. D.* (1971). Variability of Air Sampler Data // *Atmospheric Environment*. 1971. V. 5. P. 579.
- Lushnikov A. A.* (1973). Evolution of coagulating systems. *J. Col. and Interface Sci.* 1973. Vol. 45. P. 549.
- McGraw R.* (1997) Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments // *Aerosol Sci. Technol.* 1997. V. 27. P. 255–265.
- Marcus A. H.* (1968). Stochastic coalescence // *Technometrics*. 1968. V. 10, No. 1. P. 133.
- Melzac Z. A.* (1957). A scalar transport equation // *Trans. Amer. Math. Soc.* 1957. V. 85, No. 2. P. 547.
- Mészáros E.* (1978). Present status of our knowledge on the atmospheric condensation nuclei // Вопросы физики облаков. — Л.: Гидрометеиздат, 1978. — С. 157–168.

- Mikhailov A.L., Khizhnyakov V.V.* (1998). Review of experimental data on formation of aerosol pollution source at explosions. Report on Agreement No. AV-7964 between RFNC-VNIIEF and SNL, 1998.
- Nho-Kim E.Y., Michou M., Peuch V.H.* (2004). Parameterization of size-dependent particle dry deposition velocities for global modeling // *Atmospheric Environment*. 2004. V. 38. P. 1933–1942.
- Olesen H.R.* (1995). The model validation exercise at MOL: Overview of results // *Intern. J. Environment and Pollution*. 1995. V. 5, No. 4–6. P. 761.
- Olesen H.R., Mikkelsen T.* (eds.) (1992). Proceedings of the workshop on objectives for next generation of practical short-range atmospheric models. — Riso, DCAR, Roskilde, Denmark, 1992.
- Palmer T.Y., Northcutt L.I.* (1975). Convective columns above large experimental fires // *Fire Technol.* 1975. V. 11, No. 2. P. 111–118.
- Park Y.H., Lee K.J.* (1988). An analytical approach to the population balance equation for radioactive aerosols // *Annals of Nuclear Energy*. 1980. V. 15. P. 141–154.
- Pasquill F.* (1975). *Atmospheric diffusion*. — N.Y.: John Wiley and Sons, 1975.
- Penner J.E., Haselman L.C., Edwards L.L.* (1985). Buoyant plume calculations. Paper No. 84-0459 for AIAA 23rd Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada, January 14–17, 1985.
- Petroff A., Mailliat A., Amielh M., Anselmet F.* (2008a). Aerosol dry deposition on vegetative canopies. Part I: Review of present knowledge // *Atmospheric Environment*. 2008. V. 42. P. 3625–3653.
- Petroff A., Mailliat A., Amielh M., Anselmet F.* (2008b). Aerosol dry deposition on vegetative canopies. Part II: A new modelling approach and applications // *Atmospheric Environment*. 2008. V. 42. P. 3654–3683.
- Petroff A., Zhang L., Pryor S.C., Belot Y.* (2009). An extended dry deposition model for aerosols onto broadleaf canopies // *J. Aerosol Sci.* 2009. V. 40. P. 218–240.
- Piskunov V.N.* (1997). Coagulation kinetics of composite particles // *J. Aerosol Sci.* 1997. V. 28. Suppl. 1. P. 647–648.
- Piskunov V.N.* (2009). Parameterization of aerosol dry deposition velocities onto smooth and rough surfaces // *J. Aerosol Sci.* 2009 (submitted).
- Piskunov V.N., Aloyan A.E., Gerasimov V.M. et al.* (1995a). Numerical simulation of industrial and accidental release formation and transport. Report LANL LA-SUB-94-175. Order No. DE95011618. 1995.
- Piskunov V.N., Statsenko V.P., Kharchenko A.I. et al.* (1995b). Mathematical simulation of atmospheric pollutants mesoscale transport and transformation. The report by RFNC-VNIIEF on Phase 1 of ISTC Project No. 47. 1995.
- Piskunov V.N., Golubev A.I., Goncharov E.A., Ismailova N.A.* (1997a). Kinetic modeling of composite particles coagulation // *J. Aerosol Sci.* 1997. V. 28, No. 7. P. 1215–1231.
- Piskunov V.N., Aloyan A.E., Marchuk G.I. et al.* (1997b). Mathematical simulation of atmospheric pollutants mesoscale transport and transformation. Final Project Technical Report of ISTC 047-95. RFNC-VNIIEF, INM RAS, 1997.

Piskunov V.N., Aloyan A.E. (2002). Mathematical simulation of atmospheric pollutants mesoscale transport and transformation: kinetics of aerosol formation in clouds. Final Project Technical Report of ISTC 1078-99 (RFNC-VNIIEF, INM RAS), 2002.

Piskunov V.N., Golubev A.I. (2002). The generalized approximation method for modeling coagulation kinetics. Part 1: Justification and implementation of the method // J. Aerosol Sci. 2002. V. 33. P. 51–63.

Piskunov V.N., Petrov A.M. (2002). Condensation/coagulation kinetic for mixture of liquid and solid particles: Analytical solutions // J. Aerosol Sci. 2002. V. 33. P. 647–657.

Piskunov V.N., Zatevakhin M.A. (2002). Numerical simulation of aerosol particle formation kinetics in large fires // Abstracts of Sixth International Aerosol Conference, Taipei, Taiwan, September 9–13, 2002. V. 1. P. 487–488.

Piskunov V.N., Golubev A.I., Barrett J.C., Ismailova N.A. (2002). The generalized approximation method for modeling coagulation kinetics. Part 2: Comparison with other methods // J. Aerosol Sci. 2002. V. 33. P. 65–75.

Piskunov V.N., Petrov A.M., Golubev A.I. (2003). Modeling particle formation kinetics in mixed-phase clouds // J. Aerosol Sci. 2003. V. 34. P. 1555–1580.

Piskunov V.N., Povyshv V.M. (2003) Particle spectra retrieval from integral characteristics // Abstracts of the «EAC-2003», Madrid, Spain, August 31–Sept. 5, 2003. V.II. P. S853–S854.

Pruppacher H.R., Klett J.D. (1997). Microphysics of cloud and precipitation. — Dordrecht: Kluwer Academic Press, 1997.

Rogers R.R. (1978). A short course in cloud physics. — Oxford: Pergamon Press, 1978.

Ruckenstein E., Pulvermacher B. (1973) Growth kinetics and the size distributions of supported metal crystallites // J. Catal. 1973. V. 29. P. 224.

Saffman P.G., Turner J.S. (1956). On the collision of drops in turbulent clouds // J. Fluid Mech. 1956. V. 1. Part 1. P. 16.

Schuman T. (1940). Theoretical aspects of the size distribution of fog particles // Quart. J. Roy. Met. Soc. 1940. V. 66. P. 195.

Scott W.T. (1968). Analytic studies of cloud droplet coalescence // J. Atm. Sci. 1968. V. 25, No. 1. P. 54–65.

Sehmel G.A. (1970). Particle deposition from turbulent air flow // J. Geoph. Res. 1970. V. 75, No. 9. P. 1766.

Sehmel G.A. (1973). Particle eddy diffusivities and deposition for isothermal flow and smooth surfaces // J. Aerosol Sci. 1973. V. 4. P. 125–138.

Sehmel G.A. (1980). Particle and gas dry deposition: A review // Atmospheric Environment. 1980. V. 14. P. 983–1011.

Sehmel G.A., Hodgson W.J. (1978). A model for predicting dry deposition of particles and gases to environmental surfaces. PNL-SA-6721. Battelle, Pacific Northwest Laboratory, Richland, WA, 1978.

Shiino J. (1978). A numerical study of precipitation development in cumulus clouds // Papers in Meteorology and Geophysics. 1978. V. 29, No. 4. P. 157–194.

- Silk J., White S.D.* (1978). The development of structure in the expanding universe // *Astroph. J.* 1978. V. 223. P. L59.
- Simons S.* (1981). The coagulation and deposition of radioactive aerosols // *Annals of Nuclear Energy.* 1981. V. 8. P. 287–294.
- Sippola M.R., Nazaroff W.W.* (2002). Particle deposition from turbulent flow: Review of published research and its applicability to ventilation ducts in commercial buildings. Lawrence Berkeley National Laboratory, Report LBNL-51432, 2002.
- Slinn W.G.N.* (1978). Parameterization for resuspension and for Wet and Dry Deposition of Particles and Gases for Use in Radiation Dose Calculations // *Nucl. Safety.* 1978. V. 19(2). P. 205–219.
- Slinn W.G.N.* (1982). Prediction for particle deposition to vegetative canopies // *Atmospheric Environment.* 1982. V. 16. P. 1785–1794.
- Smoluchowsky M.* (1916). Drei Vortrage uber Diffusion, Brownische Bewegung und Koagulation von Kolloidteilchen // *Phys. Z.* 1916. Bd. 17. S. 577.
- Snegirev A.Yu., Makhviladze G.M., Roberts J.P.* (2001). The effect of particle coagulation and fractal structure on the optical properties and detection of smoke // *Fire Safety J.* 2001. V. 36. P. 73–95.
- Sojronov V.N., Yanilkin Yu. V., Tarasov V.I. et al.* (1997). Numerical simulation for mesoscale transport of aerosols with regard to orography // *J. Aerosol Sci.* 1997. V. 28, Suppl. 1. P. 463–464.
- Stewart K.* (1956). The condensation of a vapour to an assembly of droplets or particles // *Trans. Far. Soc.* 1956. V. 52. Part 2. P. 161–172.
- Twomey S.* (1966). Computations of rain formation by coalescence // *J. Atm. Sci.* 1966. V. 23, No. 4. P. 403.
- Upadhyay R.R., Ezekoye O.A.* (2006). Treatment of size-dependent aerosol transport processes using quadrature based moment methods // *J. Aerosol Sci.* 2006. V. 37. P. 799–819.
- Valentine J.R., Smith P.J.* (2005). Numerical Predictions of Deposition with a Particle Cloud Tracking Technique. Reaction Engineering International. Salt Lake City, <http://www.reaction-eng.com/downloads/deposit.pdf>.
- Waldman G.D., Reinecke W.G., Glenn D.C.* (1972). Raindrop breakup in the shock layer of a high-speed vehicle // *AIAA J.* 1972. V. 10, No. 9. P. 1200.
- Warner J.* (1973). The Microstructure of cumulus cloud: Part IV. The effect on the droplet spectrum of mixing between cloud and environment // *J. of Atm. Sci.* 1973. V. 30. P. 256–261.
- Willis P.T., Hallett J.* (1991). Microphysical measurements from an aircraft ascending with a growing isolated maritime cumulus tower // *J. of Atm. Sci.* 1991. V. 48, No. 2. P. 283–300.
- Wood N.B.* (1981). The mass transfer of particles and acid vapour to cooled surfaces // *Journal of the Institute of Energy.* 1981. V. 76. P. 76–93.
- Wood N.B.* (1981a). A simple method for the calculation of turbulent deposition to smooth and rough surfaces // *J. Aerosol Sci.* 1981. V. 12. P. 275–290.
- Wright D.L.* (2000). Retrieval of optical properties of atmospheric aerosols from moments of the particle size distribution // *J. Aeros. Sci.* 2000. V. 31. P. 1–18.

-
- Ziff R. M., Stell G.* (1980). Kinetics of polymer gelation // *J. Chem. Phys.* 1980. V. 73, No. 7. P. 3492.
- Yamada T., Williams M., Stone G.* (1989). Chemical downwind hazard modeling study. LA-UR-89-1061.
- Yang Y., Shao Y.* (2008). Numerical simulations of flow and pollution dispersion in urban atmospheric boundary layers // *Environmental Modelling & Software*. 2008. V. 23. P. 906–921.
- Zhao B., Wu J.* (2006a). Modeling particle deposition from fully developed turbulent flow in ventilation duct // *Atmospheric Environment*. 2006. V. 40. P. 457–466.
- Zhao B., Wu J.* (2006b). Modeling particle deposition onto rough walls in ventilation duct // *Atmospheric Environment*. 2006. V. 40. P. 6918–6927.
- Zhao B., Wu J.* (2007). Particle deposition in indoor environments: Analysis of influencing factors // *Journal of Hazardous Materials*. 2007. V. 147. P. 439–448.

Научное издание

ПISKУНОВ Владимир Николаевич

ДИНАМИКА АЭРОЗОЛЕЙ

Редактор *О.В. Салецкая*

Оригинал-макет: *Е.Н. Водоватова*

Оформление переплета: *А.В. Андросов*

Подписано в печать 03.12.2010. Формат 60×90/16. Бумага офсетная.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 18,5. Уч.-изд. л. 20,35. Тираж 100 экз.
Заказ №

Издательская фирма «Физико-математическая литература»

МАИК «Наука/Интерпериодика»

117997, Москва, ул. Профсоюзная, 90

E-mail: fizmat@maik.ru, fmlsale@maik.ru;

<http://www.fml.ru>

Отпечатано в ПФ «Полиграфист»

160001, г. Вологда, ул. Челюскинцев, 3

Тел.: (8172) 72-07-92, 72-61-75, 72-60-63; факс: (8172) 76-00-49, 72-71-11

E-mail: forma@pfpoligrafist.com

ISBN 978-5-9221-1286-4



9 7859 2 112864