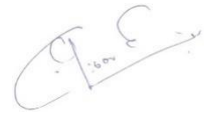


На правах рукописи



Пхильо Вэй Лин

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛО- И МАССОПЕРЕНОСА И ФАЗОВЫХ
ПЕРЕХОДОВ В ВЫСОКОДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМАХ ПРИ
ВОЗДЕЙСТВИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ**

Специальность: 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2025

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технологический университет «СТАНКИН».

Научный руководитель: **Уварова Людмила Александровна**
доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой прикладной
математики ФГАОУ ВО «МГТУ «СТАНКИН».

Официальные оппоненты: **Плетнев Леонид Владимирович**
доктор физико-математических наук, доцент,
профессор кафедры общенаучных дисциплин
ФГБОУ ВО «Тверской государственный
технический университет», г. Тверь,

Кадымов Вагид Ахмедович
доктор физико-математических наук,
профессор, профессор кафедры высшей
математики-3 ФГБОУ ВО «МИРЭА –
Российский технологический университет»,
г. Москва.

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего
образования «Московский государственный
технический университет имени Н.Э. Баумана
(национальный исследовательский
университет)», г. Москва.

Защита состоится «25» июня 2025 г. в 15:00 часов на заседании
диссертационного совета 24.2.332.02 при ФГАОУ ВО «Московский
государственный технологический университет «СТАНКИН» по адресу: 127994,
г. Москва, Вадковский пер., д. 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО
«МГТУ «СТАНКИН», www.stankin.ru.

Автореферат разослан «___» _____ 2025 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
24.2.332.02
к.т.н., доцент

Тюрбеева Татьяна Борисовна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность исследования. В настоящее время во всем мире имеет место большой интерес к мезо- и наночастицам различных веществ. Это связано с тем, что из-за их реальных свойств использование нано- и мезосистем постепенно становится возможным в различных областях. Свойства наноструктур могут быть связаны с изменением размера, формы, организации и структуры, и, следовательно, поведение маленьких частиц может существенно отличаться от объёмного вещества. Поэтому изучение фазовых переходов ввиду широкого распространения новых материалов, сред, мезо- и наноструктур приобретает важное значение. Исследование фазовых переходов и процессов переноса требует применения и развития современных разделов математических методов моделирования. Для моделирования фазовых переходов в настоящее время используются, например метод фазового поля, метод ренорм-группы, стохастический анализ и другие.

В диссертационной работе будут исследоваться фазовые переходы первого рода в поле электромагнитного излучения с использованием современных математических методов моделирования.

В связи с необходимостью разработки управления металлическими и диэлектрическими частицами различных размеров стало важным изучение взаимодействия электромагнитного излучения с высокодисперсными структурами.

Понимание природы фазовых переходов в самом широком смысле представляется необходимым для понимания фундаментальной природы физических явлений.

В биологических системах примеры фазовых переходов включают формирование липидного биослоя, переход катушки-глобулы в процесс сгибания белка, плавление ДНК и многие другие.

В наноэлектронике фазовые переходы могут служить основой для разработки новых устройств, таких как мемристоры и память на основе фазовых переходов. В катализе они способны значительно влиять на активность и селективность каталитических наночастиц. В технологиях накопления и преобразования энергии, таких как аккумуляторы, суперконденсаторы и топливные элементы, фазовые переходы также играют важную роль.

Тем не менее, из-за уникальных физических и химических свойств наноструктур, наряду с положительными эффектами, они могут представлять и определённые риски. Однако, благодаря многочисленным преимуществам, использование наночастиц в различных областях становится всё более приоритетным.

Степень разработанности темы исследования. В середине XIX века появились первые идеи о случайности в сложных процессах. В 1860 году Джеймс Максвелл высказал идею, что столкновения молекул газа способны усиливать малые возмущения, приводя к хаотичному поведению. В 1890 году Анри Пуанкаре выявил, что решение задачи трёх тел зависит от начальных условий и предположил, что подобные явления могут быть широко распространены. В 1937 году благодаря теории Л. Д. Ландау и флуктуационной теории фазовых переходов произошел значительный прогресс в качественном понимании непрерывных фазовых переходов, а также в их количественном описании. Точное решение для 2D модели Изинга было найдено Л. Онсагером в 1944 году.

Труды Анри Пуанкаре, Алексея Михайловича Ляпунова, Джорджа Дейвида Биркгофа и Андрея Николаевича Колмогорова заложили основы теории хаоса и стимулировали развитие нелинейной динамики и качественной теории дифференциальных уравнений. Уравнения Навье-Стокса для потока жидкости, позволяющие описать, в частности движение твёрдых частиц и капель, несмотря на трудность их полного анализа, могут быть упрощены для частных случаев. Полученные результаты и их связь с энтропией, позволяли делать качественные и количественные оценки для фазовых превращений в различных системах. Из приведённых примеров следует, что исследование фазовых переходов, а также сопровождающих их процессов тепло- и массопереноса, является важным для самых разных научных и технических областей.

Ввиду всё большего внедрения в различных технических приложениях мезо- и наноструктур, а также материалов с заданными свойствами, исследование фазовых переходов и процессов переноса в таких системах, является достаточно актуальным. Кроме того, важным является учёт влияния внешних воздействий, прежде всего электромагнитного поля, которое, в свою очередь, зависит от характеристик таких систем.

В 1948 году Лев Давидович Ландау и немецкий математик Эберхард Хопф анализировали подход к возникновению турбулентности, который называют сценарием Ландау-Хопфа. Было показано, что качественный переход «ламинарное течение-турбулентность» представляет собой переход от детерминированного течения к хаотическому. В 1963 году Эдвард Лоренц, исследуя конвекцию в двумерном слое, выявил хаотичное поведение, связанное с чувствительностью к начальным условиям, и визуализировал первый странный аттрактор – «систему Лоренца». Многие динамические системы, такие, как система Лоренца, Рёсслера и Чуа, содержат самовозбуждающиеся аттракторы, притягивающие траектории к устойчивым состояниям. Позже были обнаружены скрытые аттракторы, не связанные с неустойчивыми равновесиями, что затрудняет их локализацию. Новый метод поиска скрытых аттракторов в многомерных системах был разработан Геннадием Александровичем Леоновым и Николаем Владимировичем Кузнецовым в 2010 году. Позже этот метод впервые позволил выявить скрытый хаотический аттрактор в электронной схеме Чуа.

В книге Я. Г. Синая «Теория фазовых переходов. Строгие результаты», отражен формализм, позволяющий изучать непосредственно бесконечные системы статистической механики в пространстве или на решетках. В 2019 году Р. Р. Мухин рассматривал перемешивающий слой, который может являться моделью слоя, в котором непосредственно происходит фазовый переход. Непосредственно процесс испарения в дисперсных системах, таких, как капли и капилляры, рассматривается во многих работах, начиная с классических работ Кнудсена и Фукса. Рассматривалось как испарение, происходящее вследствие разности давления насыщенного пара на поверхности испарения и давления пара вдали от неё, так и испарение, обусловленное тепловым источником. Применение динамических систем для моделирования процесса испарения в дисперсных неоднородных по составу (бинарные и многокомпонентные растворы) системах исследовалось рядом авторов. В частности, можно указать

работы таких авторов как Л. А. Уварова, Ю. И. Яламов, Е. Р. Щукин и др. В работах Ф. Мухамедова развивается подход моделирования возникновения фазовых переходов в p -адическом пространстве с использованием квазигиббсовой меры. Большое количество работ, посвященное данной проблеме, свидетельствует о научном интересе к ней. Вместе с тем многие вопросы, в частности, такие как процессы фазовых переходов и тепломассопереноса в высокодисперсных нелинейных системах в электромагнитных полях ещё недостаточно разработаны.

Целью работы является установление качественных и количественных закономерностей нелинейных тепло- и массопереноса и фазовых переходов первого рода в дисперсных системах под действием электромагнитного поля за счёт разработки математических моделей, метода и алгоритмов.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **научные задачи**:

- провести анализ существующих подходов к моделированию фазовых переходов и тепломассопереноса в дисперсных системах при внешнем воздействии;
- провести обзор современных математических методов, применяемых для моделирования фазовых переходов и процессов переноса;
- разработать математическую модель определения условий возникновения электромагнитного резонанса при воздействии нелинейного электромагнитного поля на дисперсные частицы;
- разработать численно-аналитический метод определения температуры в дисперсной системе в электромагнитном поле, особенностью которого является выделение резонансной гармоник;
- исследовать тепло-и массоперенос (индуцированные эффекты) в двухслойных мезо- и наносистемах с использованием предложенной модели и метода;
- разработать модификацию алгоритма Хошена-Копельмана для применения в моделировании фазовых переходов первого рода;
- разработать модель фазового перехода первого рода «жидкость-газ» в ограниченной области с испаряющейся поверхностью мезо- или наноструктуры;
- с использованием построенной модели рассмотреть возможность применения p -адического анализа и модели Поттса для выявления деталей фазовых переходов первого рода и определения энтропии;
- на основе построенных моделей и алгоритмов разработать комплекс программ и провести вычислительные эксперименты.

Объектом исследования являются жидкие и твёрдые мезо- и нанообъекты с нелинейными свойствами, находящиеся в газовой сфере и подверженные воздействию электромагнитного поля.

Предметом исследования являются численные и аналитические методы анализа и исследования процессов тепло-и массопереноса и фазовых переходов при внешних воздействиях электромагнитных полей.

Научная новизна заключается в следующем:

- Разработана математическая модель для определения условий возникновения электромагнитного резонанса в оптически нелинейных системах,

диэлектрическая проницаемость которых зависит от поля: для двухслойных сферических частиц и двух близко расположенных дисперсных частиц.

- Разработан численно-аналитический метод определения температуры в дисперсной системе в нелинейном электромагнитном поле, особенностью которого является выделение резонансной гармоника.

- Выявлены закономерности и особенности индуцированного теплопереноса в двухслойных мезо- и наносистемах, а также в системе с двумя сферическими частицами, взвешенными в континуальной среде, с различными оптическими и теплофизическими свойствами. В двухслойной сферической частице выявлены закономерности и особенности массопереноса вида «диффузия-реакция», обусловленного нагреванием вследствие воздействия электромагнитного поля.

- Разработана модификация алгоритма Хошена -Копельмана, позволяющая проводить вычисления для моделирования фазовых переходов первого рода в высокодисперсных системах в приповерхностном слое. В модификацию включено число Кнудсена, а заполнение узлов или ячеек происходит с вероятностью, рассчитываемой с помощью зависящей от температуры функции распределения по скоростям.

- Предложена модель фазового перехода для системы «жидкость-газ» в виде древовидных графов состояний, зависящих от температуры на поверхности испарения и для газовой фазы вблизи поверхности фазового перехода. С использованием построенной модели предложен подход применения р-адического анализа и модели Поттса.

Теоретическая значимость заключается в предложении новых моделей для описания фазовых переходов на границе жидкости и газа, а также в предложенном методе определения температуры для мезо- и наносистем, находящихся в электромагнитном поле. Предложенные модели, метод и алгоритмы могут формировать основу для более сложных систем, например, для коллективов неоднородных частиц с нелинейными свойствами. Решаемая задача имеет важное фундаментальное значение для развития такой отрасли знаний как прикладная математика и прикладное значение для приборостроения и нанотехнологий.

Практическая значимость. Разработанные математические модели, алгоритмы и программный комплекс могут быть использованы в непосредственных расчётах для высокодисперсных структур, находящихся в поле электромагнитного излучения, а также для управления мезо- и наночастицами в жидких и газовых средах с применением электромагнитного источников. Исследуемая проблема имеет важное прикладное значение для таких отраслей народного хозяйства, как приборостроение, нанотехнологии и другие. В том числе, исследование решаемой задачи имеет большое значение для народного хозяйства в Республике Союз Мьянма: для усовершенствования процессов сушки сельскохозяйственных культур и пищевых продуктов с использованием электромагнитных полей, для оптимизации удаления влаги и сохранения качества, развития синтеза и обработки структур и материалов. Это могут быть наночастицы или покрытия, которые имеют важное значение для растущего промышленного сектора Мьянмы: разработка эффективных технологий очистки

воды и отходов с использованием фазовых переходов и электромагнитных методов для решения местных экологических проблем, усовершенствование солнечных тепловых систем и процессов переработки биомассы с помощью передовых моделей тепло- и массообмена, способствующих внедрению решений в области устойчивой энергетики в Мьянме.

Результаты работы также могут быть использованы при обучении студентов по направлениям: «Информатика и вычислительная техника», «Прикладная математика», «Прикладная информатика», «Физика и технология наноструктур», «Лазерная техника и лазерные технологии».

Работа выполнена в рамках проекта по государственному заданию Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № FSFS- 2024-0007.

Методы исследования. В диссертации использовались методы математической физики, численные методы, методы р-адического анализа, методы теории перколяции, теория графов, положения теории хаоса, положения электродинамики, теплофизики, физической кинетики. На основе разработанных моделей, метода и алгоритмов при помощи прикладного ПО MatLab r2021a создан комплекс программ.

Основные положения, выносимые на защиту:

– Модель определения условий возникновения электромагнитного резонанса для оптически нелинейных дисперсных частиц.

– Численно-аналитический метод определения температуры в дисперсной системе в электромагнитном поле, особенностью которого является выделение резонансной гармоник.

– Результаты исследования закономерностей и особенностей тепло- и массопереноса в электромагнитном поле в двухслойных мезо-и наносистемах с нелинейными свойствами. Результаты исследования закономерностей и особенностей нелинейного теплопереноса в двух близко расположенных дисперсных частицах в электромагнитном поле.

– Модифицированный алгоритм Хошена-Копельмана для моделирования фазовых переходов первого рода.

– Модель фазового перехода первого рода для высокодисперсных структур вблизи поверхности испарения.

– Предложенный подход моделирования фазового перехода первого рода с использованием р- адического анализа.

– Программный комплекс для вычислений на основе разработанных моделей и алгоритмов.

Степень достоверности результатов. Достоверность результатов обусловлена применением корректного математического аппарата математической физики и других разделов, указанных выше, применением известных алгоритмов для проведения расчётов в отдельных блоках программного комплекса. Результаты согласуются с известными результатами в предельных случаях.

Апробация полученных результатов. Основные результаты и аспекты работы докладывались на: - международной конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем», Россия, Москва, 2019 г., 2020 г., 2021 г., 2022 г., 2023 г., 2024 г. - Конференции «Математика. Компьютер. Образование»

(МКО), Россия, г. Пушкино/ г. Дубна, 2019 г., 2020 г., 2021 г. - 18 международной конференции по численному анализу и прикладной математике (ICNAAM 2020), Греция, Родос, 2020 г. - 2020 IEEE Conference on Computer Applications (ICCA), Yangon, Myanmar, 2020 г. - 4th International Conference on Intelligent Computing and Control Systems (ICICCS), Madurai, India, 2020.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности. Диссертационная работа соответствует научной специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ паспорту специальности по следующим пунктам: пункт 1. Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений; пункт 5. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.

Публикации: По теме диссертации опубликовано 11 печатных работ: из них 2 работы в журналах, входящих в перечень ВАК и 1 статью в журнале, индексируемых в наукометрических базах данных Scopus.

Структура и объем диссертации: Диссертация включает введение, 5 глав и основные выводы, имеет общий объём 214 страниц, содержит 27 рисунка и 3 таблицы. Список цитируемой литературы насчитывает 213 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении к работе обосновывается актуальность темы диссертации, приводятся основные сведения о работе.

В первой главе проведены обзор и анализ современных научных подходов к моделированию процессов фазовых переходов и массопереноса в высокодисперсных системах. Основное внимание уделено фазовым переходам первого рода, таким как переход «жидкость-газ», и их особенностям при воздействии электромагнитного поля.

В обзоре рассмотрены процессы испарения и конденсации в каплях, капиллярах и пористых материалах. Обсуждаются методы моделирования испарения капель, включая классические формулы Максвелла и современные кинетические подходы, учитывающие влияние числа Кнудсена.

В первой главе рассмотрены методы решения нелинейных уравнений, которые необходимы для описания нелинейных процессов переноса, в том числе, в электромагнитных полях. Уделяется внимание задачам типа «диффузия-реакция» и интегрируемым нелинейным уравнениям, включая уравнения Кортевега-де Вриза, Синус-Гордон и нелинейное уравнение Шрёдингера.

Представленные в главе методы и результаты анализа закладывают фундамент для дальнейшего изучения нелинейных процессов в высокодисперсных системах. Обзор процессов испарения, конденсации и поведения жидкостных систем в капельных и капиллярных структурах формирует основу для моделирования, применяемого в следующих главах диссертации.

Во второй главе рассмотрены современные математические методы, которые могут быть применены для исследования фазовых переходов и процессов тепло- и массопереноса в высокодисперсных системах. Основное

внимание уделено нелинейным динамическим системам, теориям хаоса и критических явлений, методом перколяции, p -адическому анализу.

В начале главы рассматриваются хаотические и динамические системы.

Имеется несколько подходов к определению энтропии как характеристики степени хаотичности системы. В 4 главе используются энтропия Колмогорова – Синая и энтропия Поттса.

1. **Энтропия Колмогорова – Синая (КС)** измеряет хаотический характер динамических систем. Её значение равно нулю для хаотических отображений, таких как вращения. Энтропия Колмогорова-Синая сохраняющего меру отображения определяется как супремум по всем разбиениям Q :

$$h(f) = \sup_Q h(f, Q) \quad (1)$$

где $h(f, Q)$ – энтропия относительно разбиения Q . f – отображение динамической системы, которое определяет эволюцию системы во времени.

2. **Энтропия Поттса** описывает степень беспорядка в q – состояниях модели Поттса на решётке. Она вычисляется через вероятность состояний:

$$S = - \sum_s P(s) \ln P(s), \quad (2)$$

где $P(s)$ – вероятность состояния s . Энтропия максимальна в хаотическом состоянии и минимальна при полном порядке.

Далее во второй главе рассматриваются методы теории перколяции (в частности, уделяется внимание дереву Кейли) и p -адического анализа. Эти методы позволяют детализировать процессы фазовых переходов первого рода и изучать структуру кластеров, возникающих в результате распределения и взаимодействия частиц вблизи поверхности испарения в ограниченных системах. Далее, в 4-й главе представлены примеры использования p -адического анализа для описания фазовых переходов в ограниченных системах.

В третьей главе исследованы особенности взаимодействия электромагнитных полей с мезо- и наносистемами, найдены условия электромагнитного резонанса в нелинейных средах, на основе нелинейных уравнений переноса разработан подход к моделированию тепло- и массопереноса в дисперсных системах в условиях электромагнитного воздействия.

Из нелинейных уравнений Максвелла в случае зависимости диэлектрической проницаемости ε от электрического вектора в квазистационарном приближении получаются следующие уравнения для амплитуд векторов электрической \mathbf{E} магнитной напряженности \mathbf{H} :

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{E}_i + k^2 \varepsilon_i(E_{i1}, E_{i2}, E_{i3}) \mathbf{E}_i &= \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}_i), i = 1, 2 \\ \Delta \mathbf{H}_i + k^2 \varepsilon_i(E_{i1}, E_{i2}, E_{i3}) \mathbf{H}_i &= \nabla(k_{1i} \times \mathbf{E}_i) \\ \nabla \cdot (k_{1i} \mathbf{E}_i) &= 0, \nabla \cdot \mathbf{H}_i = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

где вводится обозначение: $k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$, $k_{1i} = \frac{j\omega}{c} \left(\varepsilon_i + j \frac{4\pi\sigma_i}{c} \right)$, E_{mi} , ($m = 1, 2, 3$) – компонент электрического вектора, $i = 1, 2$ – номер области. При рассмотрении двухслойной сферической частицы индекс «1» относится к внутреннему слою сферы, а индекс «2» - к внешнему слою. При рассмотрении системы из двух частиц, взвешенных в континуальной среде, индекс i -это номер частицы. Комплексная диэлектрическая

проницаемость ε_i обозначается как $\varepsilon_i = \varepsilon'_i(E_{i1}, E_{i2}, E_{i3}) + j \frac{4\pi\sigma_i}{c}$, c – скорость света, σ_i – проводимость, ω – круговая частота электрического поля, j – мнимая единица. Классы точных решений уравнений (7), для которых диэлектрическая проницаемость равна нулю в различных геометриях были получены в [Уварова, Л. А. Некоторые точные решения для вектора напряженности электрического поля в сопряженных нелинейных средах. – Дубна: ОИЯИ, Препринт. №. Р 17-87-693, 1987.]. Линеаризация вблизи точных решений позволяет представить векторы так: $\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_{iT} + \mathbf{E}'_i$, $\mathbf{H}_i = \mathbf{H}_{iT} + \mathbf{H}'_i$. Полученная система уравнений эквивалентна линейным уравнениям Гельмгольца, где роль диэлектрической проницаемости играет $\hat{\varepsilon}_i = -2\varepsilon_{0i}$ и коэффициента поглощения $\hat{k}_i = \frac{8\pi\sigma_i}{\omega}$. Для внешней сферы $\sigma_2 = 0$ и решения совпадают с решениями Ми, но с использованием функций Ханкеля второго рода.

В дальнейшем рассмотрено нагревание дисперсной системы, находящейся под действием электромагнитного излучения. Предложен метод, в котором важную роль играет условие (условия) электромагнитного резонанса. В теории Ми такими условиями являются равенство нулю знаменателя той или иной гармоники решения.

При рассмотрении электродинамической нелинейной системы получаются условия резонанса, отличающиеся от линейного случая. В частности, такое условие может быть получено из приближённых решений \mathbf{E}'_1 , \mathbf{H}'_1 при $R_2 \gg R_1$ с использованием величин $\hat{\varepsilon}_i$ и \hat{k}_i . (решение может быть получено с помощью электрического и магнитного потенциалов Дебая). Такое условие резонанса имеет вид:

$$\sqrt{\hat{\varepsilon}_i} \xi_l^{(2)'}(k\sqrt{\hat{\varepsilon}_2}R_1)\psi_l(k\sqrt{\hat{\varepsilon}_1}R_1) - \sqrt{\hat{\varepsilon}_j} \psi'_l(k\sqrt{\hat{\varepsilon}_1}R_1) \xi_l^{(2)}(k\sqrt{\hat{\varepsilon}_2}R_1) = 0 \quad (4)$$

где $\xi_l^{(2)}(x) = \sqrt{\frac{\pi x}{2}} H_{l+1/2}^{(2)}(x)$, $H_{\nu}^{(2)}(x)$ – функции Ханкеля второго рода, $\hat{\varepsilon}_1 = -2\varepsilon_{10} - j \frac{8\pi\sigma_1}{\omega}$. Показано также, что при рассмотрении системы из двух частиц, возникновение резонанса в одной частице приводит к сильному возрастанию коэффициентов разложения решения для второй частицы. Таким образом, в этом случае условия, близкие к условиям возникновения резонанса, возникают в двух взаимодействующих частицах. Непосредственно условие возникновения резонанса в i -частице имеет вид:

$$\sqrt{\hat{\varepsilon}_i} \xi_l^{(2)'}(k^{(0)}\sqrt{\hat{\varepsilon}_0}R_i)\psi_l(k^{(0)}\sqrt{\hat{\varepsilon}_i}R_i) - \sqrt{\hat{\varepsilon}_i} \psi'_l(k^{(0)}\sqrt{\hat{\varepsilon}_i}R_i) \xi_l^{(2)}(k^{(0)}\sqrt{\hat{\varepsilon}_0}R_i) = 0,$$

где индекс «0» относится к материалу окружающей среды.

В общем случае, количество поглощённой электромагнитной энергии и плотность теплового источника во внутренней области системы определяются через параметры лазерного излучения и электромагнитного поля:

$$q = m'_1 m''_1 I_0 k |\mathbf{E}_1|^2 / (\sqrt{\varepsilon_{20}} |\mathbf{E}_0|^2) \quad (5)$$

где I_0 – мощность лазерного излучения, m_1 – комплексный показатель преломления

$$m_1 = m'_1 + j m''_1, \quad m'_1 = \left(0.5 \left(\varepsilon_{10} + \left(\varepsilon_{10}^2 + \frac{16\pi^2\sigma^2}{\omega^2} \right)^{0.5} \right) \right)^{0.5}, \quad m''_1 = \frac{2\pi\sigma}{\omega m'_1}, \quad \mathbf{E}_0 –$$

амплтуда электрического вектора падающей волны.

Получены условия для возникновения электромагнитного резонанса в двух частицах для случая зависимости диэлектрической проницаемости от поля. Учёт зависимости диэлектрической проницаемости от электрического вектора приводит к более сложным условиям резонанса по сравнению с полученным ранее линейным приближением [И. В. Кривенко и др., 2001 г.], при которых имеется связь между коэффициентами разложения в ряд, что получено в диссертации.

Если точное решение зависит только от радиальной координаты, то с помощью выражения (5) можно получить следующую формулу для плотности теплового потока:

$$q = \frac{I_0 k m_1' m_1''}{\sqrt{\varepsilon_{20}' |E_0|^2}} (|E_1'|^2 + 2(\operatorname{Re}(E_{1\rho}') E_{1r}') + \operatorname{Im}(E_{1\rho}') E_{1r}'') + ((\frac{\varepsilon_{i0}}{|\alpha_i|})^2 + \frac{16\pi^2 \sigma_i^2}{\omega^2 |\alpha_i|^2})^{0.5} \quad (6)$$

Здесь через α_i обозначен параметр нелинейности, введение которого обусловлено тем, что рассматривается квадратичная зависимость диэлектрической проницаемости от электрического вектора.

Соответственно, уравнения для температуры в каждой из областей имеют следующий вид:

$$C_p^{(i)} \rho^{(i)} \frac{\partial T^{(i)}}{\partial t} = \chi_{(i)} \left(\frac{\partial^2 T^{(i)}}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T^{(i)}}{\partial r} \right) + q_i f_i(t) \quad (7)$$

Здесь $C_p^{(i)}$ – теплоемкость при постоянном давлении, $\rho^{(i)}$ – плотность вещества в i – среде, $q_2 = 0$, $q_1 = \bar{q}$, $\chi_{(i)}$ – коэффициент теплопроводности. Здесь введена функция $f_i(t)$, поскольку действие источника в общем случае может быть прекращено или возобновлено во внутренней области:

$$f_1(t) = \begin{cases} 1, t \in [t_k, t_{k+1}], k = 0, 2, 4, \dots \\ 0, t \in [t_k, t_{k+1}], k = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

Граничные условия на внутренней границе следующие:

$$\begin{aligned} T_{(1)} &= T_{(2)} \\ -\chi \frac{\partial T_{(1)}}{\partial r} &= -\frac{\partial T_{(2)}}{\partial r} \\ \chi &= \frac{\chi_{(1)}}{\chi_{(2)}}, x = \frac{r}{R_1}, d = \frac{R_1}{R_2}, b = \left(\frac{\chi C_p^{(1)} \rho^{(1)}}{C_p^{(2)} \rho^{(2)}} \right)^{\frac{1}{2}} \\ \tau &= \frac{t}{t_\chi}, t_\chi = \frac{C_p^{(2)} \rho^{(2)} R_1^2}{\chi_{(2)}} \end{aligned} \quad (8)$$

На первом интервале воздействия постоянного электромагнитного источника решение для температуры имеет вид:

$$\begin{aligned} T_{(1)} &= T_{0(1)} + \frac{2\chi\bar{q}R_1 t_\chi}{C_p^{(1)} \rho^{(1)} r} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n b x) \varphi_n \psi_n(\tau)}{\sin(y_n b) y_n^2}, \\ T_{(2)} &= T_{0(2)} + \frac{2\chi\bar{q}R_1 t_\chi}{C_p^{(1)} \rho^{(1)} r} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n (d-x)) \varphi_n \psi_n(\tau)}{\sin(y_n (d-1)) y_n^2}, \\ 1 - \chi + \chi b \operatorname{ctg}(by) + y \operatorname{ctg}(y(d-1)) &= 0, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\varphi_n = (1 - b y_n \operatorname{ctg}(b y_n)) \left(1 - \chi + \frac{\chi b^2 y_n^2}{\sin^2(b y_n)} + \frac{y_n^2 (d-1)}{\sin^2((d-1) y_n)} \right)^{-1}.$$

$\psi_n(\tau) = 1 - \exp(-y_n^2 \tau)$ в течение первого периода времени воздействия источника. Таким образом, температура определяется при заданной мощности теплового источника, который, как показано выше, зависит от решения для задачи электродинамики.

В общем случае массоперенос через коэффициенты диффузии зависит от температуры. Также в общем случае в системе может происходить реакция, что приводит к уравнению «диффузия-реакция» под действием электромагнитных волн. В диссертации рассматривалась такая задача для двухслойной сферической частицы.

Концентрации компонентов во внутренней области происходит за счет реакции, а во внешней области – за счет диффузии:

$$\frac{\partial c_1^{(1)}}{\partial t} = -v(T_{(1)})c_1^{(1)}c_2^{(1)}, \frac{\partial c_2^{(1)}}{\partial t} = -v(T_{(1)})c_1^{(1)}c_2^{(1)}, \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial t} = D(T_{(2)})\Delta c_1^{(2)}, \quad (10)$$

$$c_2^{(2)} = 0, c_1^{(1)}(0, r) = c_1^0, c_1^{(2)}(0, r) = c_{10}, c_2^{(1)}(0, r) = c_{20}$$

Здесь верхний показатель относится к среде, $D(T^{(2)})$ - коэффициент диффузии, оператор $\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}$. Скорость реакции в общем случае зависит от температуры, в частности, по закону Аррениуса:

$$v(T_1) = v_0 \exp\left(\frac{-U}{T_{(1)}Rg}\right), \quad (11)$$

где U - энергия, характеризующая реакцию, R_g - универсальная газовая постоянная. Интегрируя первые два уравнения (10) вместе с выражением (11), можно исследовать два подхода: 1) рассмотреть температуру, зависящую от радиальной координаты и времени; 2) рассмотреть среднюю температуру по объёму $\bar{T}_{(1)}(t)$.

Средняя температура $\bar{T}_{(1)}(t)$ определяется по объёму $\frac{4\pi}{3}(R_1^3)$ и равна:

$$\bar{T}_{(1)} = T_{0(1)} + \frac{6\chi t \chi \bar{q}}{c_{\rho}^{(1)} \rho_{(1)}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\psi_n(\tau) \varphi_n}{y_n^4 b^2} (1 - y_n b \operatorname{ctg}(y_n b)) \quad (12)$$

На границе R_1 граничные условия имеют вид:

$$c_1^{(1)} = c_1^{(2)}, \frac{\partial c_1^{(1)}}{\partial r} = \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial r}, c_2^{(1)} = 0. \quad (13)$$

Решение для $c_1^{(1)}$ имеет вид:

$$c_1^{(1)} = \frac{c_1^0(c_{20} - c_1^0) \exp(-v_0(c_{20} - c_1^0)J(t))}{c_{20} - c_1^0 \exp(-v_0(c_{20} - c_1^0)J(t))}, J(t) = \int_{t_j}^t \exp\left(-\frac{U}{T_{(1)}(s)Rg}\right) ds \quad (14)$$

где t_j - начало соответствующего периода времени. Решение для $c_1^{(2)}$ получается из третьего уравнения системы (10), первого из условий (13) и выражения (14) путём решения задачи в частных производных с неоднородными краевыми условиями Дирихле $c_1^{(2)}(R_1) = c_1^{(1)}(R_1)$. На внешней границе можно поставить однородные условия Неймана: $\frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial r} = 0$ или Дирихле: $c_1^{(2)}(R_2) = 0$. В этих случаях вводится величина $\xi(t) = \int D(\bar{T}_2) dt$ в качестве аналога времени. Обозначим через $t = \gamma(\xi)$ функцию для определения времени, то есть обратную к функции $\int D(\bar{T}_2(t)) dt$ при заданной зависимости коэффициента диффузии от температуры.

Она может быть найдена с использованием выражения для температуры во внешней области. Решение указанной задачи имеет следующий вид:

$$c_1^{(2)} = \frac{c_1^{(1)}(\gamma(\xi))R_1(R_2 - r)^2}{r(R_2 - R_1)^2} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{R_2}{r} \exp(-\mu_n^2 \xi / R_2^2) (K_{1n} \sin(\frac{\pi nr}{R_2}) + K_{2n} \cos(\frac{\pi nr}{R_2})) \quad (15)$$

$$K_{10} = M_1 \int_{\kappa}^1 \frac{xdx}{\sin(\mu_0(1-\kappa)x)} - M_2 \int_{\kappa}^1 \frac{(1-x)^2 dx}{\sin(\mu_0(1-\kappa)x)}, K_{1n} = 2M_1 \int_{\kappa}^1 \frac{x \cos(\pi nx) dx}{\sin(\mu_0(1-\kappa)x)} - 2M_2 \int_{\kappa}^1 \frac{(1-x)^2 \cos(\pi nx) dx}{\sin(\mu_0(1-\kappa)x)},$$

$$K_{2n} = 2M_1 \int_{\kappa}^1 \frac{x \sin(\pi nx) dx}{\cos(\mu_0(1-\kappa)x)} - 2M_2 \int_{\kappa}^1 \frac{(1-x)^2 \sin(\pi nx) dx}{\cos(\mu_0(1-\kappa)x)}$$

$$M_1 = c_{10} \cos(\mu_0 \kappa) / (1 - \kappa), M_2 = c_1^{(0)} \kappa \cos(\mu_0 \kappa) / (1 - \kappa)^3, \kappa = 1/d.$$

Величина μ_0 определяется из уравнения $\mu_0 = \arctag(1/\mu_0)$, $\mu_0 \approx 0,863$.

Для дальнейшего анализа приведём некоторые частные случаи формулы для концентрации (10) с учётом (11)-(12). В первом случае рассмотрен изотермический процесс, который поддерживается дополнительным подводом тепла или условиями теплоизоляции после того, как произошел нагрев до некоторой температуры $\bar{T}_{k(1)} = T_{(1)}(t_k)$, например, за первый период времени $t = t_k$. В этом случае для концентрации в первой области можно записать:

$$c_1^{(1)} = \frac{c_1^0(c_{20} - c_1^0) \exp\left(-v_0(c_{20} - c_1^0) \exp\left(-\frac{U}{\bar{T}_{k(1)} R_g}\right)t\right)}{c_{20} - c_1^0 \exp\left(-v_0(c_{20} - c_1^0) \exp\left(-\frac{U}{\bar{T}_{k(1)} R_g}\right)t\right)} \quad (16)$$

Во втором случае рассматривается влияние изменяющейся во времени температуры на концентрацию при малых временах, когда можно ограничиться в разложении экспоненты, входящей в функцию $\psi_n(t)$, в ряд, ограничиваясь несколькими первыми членами ряда N (при этом коэффициенты ряда для температуры (12) убывают примерно как $\frac{1}{y_n^2}$, например при $\chi \sim 1, b \sim 1$ величина

$y_n = \frac{\pi n}{d}$). В этом случае выражение для интеграла $J(t)$ из (18) имеет вид:

$$J(t) \approx \frac{T_{0(1)} + \bar{q}Qt}{2.3\bar{q}Q} \exp\left(-\frac{U}{R_g(T_{0(1)} + \bar{q}Qt)}\right) - \frac{T_{0(1)}}{2.3\bar{q}Q} \exp\left(-\frac{U}{R_g T_{0(1)}}\right) + \frac{U}{R_g T_{0(1)}} \left(\ln\left(\frac{T_{0(1)}}{T_{0(1)} + \bar{q}Qt}\right) + \frac{T_{0(1)}}{T_{0(1)} + \bar{q}Qt} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{nn!} \left(\left(\frac{U}{R_g(T_{0(1)} + \bar{q}Qt)}\right)^n - \left(\frac{U}{R_g T_{0(1)}}\right)^n \right) \right) \quad (17)$$

где обозначено $Q = \frac{6\chi}{c_p^{(1)} \rho^{(1)}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n}{y_n^2 b^2} (1 - y_n \text{bctg}(y_n b))$. При получении (17) возникает

интегральный логарифм $li(x)$, который был разложен в ряд согласно известной формуле Гонта:

$$li(x) = \gamma + \ln(\ln x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\ln x)^n}{nn!},$$

γ - постоянная Эйлера.

Из (17) следует, что величина концентрации во внутренней области, на границе областей, а также концентрации, пересекшей границу и попавшей во вторую область, зависят от параметра нелинейности электродинамической задачи, от которого зависит плотность теплового источника. Из (6) следует, что

в выражение для теплового источника входит параметр нелинейности α . Соответственно, от него зависит температура в каждой из областей, поскольку она пропорциональна плотности теплового источника. Следовательно, через скорость реакции массоперенос зависит от характера зависимости диэлектрической проницаемости от поля.

Поскольку, среда внешней области является непоглощающей, то скорость реакции, которая способствует распространению концентрации из области (1) в область (2), зависит от плотности теплового источника \bar{q} . Как показано выше, параметр нелинейности непосредственно влияет на эту величину и через температуру на скорость реакции. Большие значения параметра α приводят к увеличению энергетического барьера. Это, в свою очередь, приводит к тому, что основная часть концентрации $c_1^{(2)}$ некоторое время находится вблизи границы раздела (возникает барьерный эффект для распространения концентрации), а затем она постепенно диффундирует далее. Такой концентрационный барьер, в свою очередь, влияет и на электродинамические характеристики внешней области. При уменьшении α во внешней области (также, как и во внутренней) происходит переход от активационного к независящему от температуры режиму реакции.

Другим механизмом, переводящим активационный режим реакции в режим, который не зависит от температуры, является возникновение электромагнитного резонанса. При этом также происходит качественное изменение зависимости $c_1^{(1)}(t)$ вследствие значительного возрастания температуры в выражении (14). Из вышеизложенного следует, что параметр электродинамической нелинейности и размер внутренней области r_1 могут являться управляющими параметрами для массопереноса в рассматриваемой системе. В том числе, от их значений может зависеть режим, в котором происходит распространение концентрации.

Расчеты проводятся с использованием разработанного численно-аналитического метода, соответствующего алгоритма и по программе, код которой находится в приложении к пятой главе диссертации. На рисунке 1 представлена модель процесса переноса по механизму «реакция – диффузия» в двухслойной частице.



Рисунок 1. Модель процесса переноса “реакция – диффузия”

Расчёты проводились для модели, состоящей из внешнего слоя жидкого кристалла N- (4-метоксибензилден)-4 бутиланилина (размер – 10 нм) и внутреннего слоя белка аланина (размер – 1 нм). Эта программа MATLAB

моделирует тепловое воздействие лазерного излучения на два различных материала, аланин (разновидность белка) и МВВА (нематический жидкий кристалл / N-(4-метоксибензилиден)-4-бутиланилина), используя HeNe (гелий-неоновый) лазер с длиной волны 633 нм, мощность лазера 50 МВт (милливатт). Программа рассчитывает поглощение энергии и результирующее изменение температуры в каждом материале на основе нескольких факторов, таких как диэлектрические свойства, теплопроводность и размеры области. На температуру в каждой точке влияет несколько факторов, в том числе: теплоемкость (C_p^1 и C_p^2) материалов, теплопроводность (χ_1 и χ_2), плотность (ρ_1 , ρ_2) материалов, радиус зоны воздействия лазера в каждой области. Изменение температуры в каждой области отслеживается в течение различных временных интервалов (τ), варьирующихся от 0,01 до 1200 секунд.

Программа даёт подробные графики и результаты для определения температуры и распределения тепла в обоих материалах при лазерном воздействии. Поглощенная энергия рассчитывается как для малых, так и для больших областей с нелинейными свойствами, показывая, как каждый материал реагирует на лазерное воздействие. Рассчитывается и визуализируется повышение температуры с течением времени, что позволяет выявить различия в том, как аланин и МВВА поглощают и рассеивают лазерную энергию.

На рисунке 2 показана взаимосвязь между концентрацией и температурой в разных областях модели. Верхний левый график показывает связь между первой концентрацией и температурой во внешней области, где концентрация резко снижается, а затем стабилизируется по мере повышения температуры. На верхнем правом графике показано, что концентрация постепенно снижается с повышением температуры, что указывает на более плавную тенденцию по сравнению с внешней областью. Нижний график: показана связь концентрации и температур в модели. График выглядит почти ровным, влияние температуры на концентрацию в разных областях может быть минимальным или усредненным. При меньших размерах и более высоких концентрациях температура становится выше. При больших размерах и более низких концентрациях температура резко падает, что означает изменение условий стабильности системы. Резкое изменение указывает на границу, где может происходить фазовый переход.

В общем случае гармоники для электрического вектора \mathbf{E}'_i зависят от трёх координат. Поэтому для моделирования теплопереноса в квазистационарном приближении необходимо решать уравнения теплопроводности:

$$\nabla(\chi_i \nabla T_i) = -q_i, \nabla(\chi_m \nabla T_m) = 0, \quad (18)$$

где $i=1, m=2$ для двухслойной сферической частицы и $i=1,2, m=0$ для двух частиц. При выполнении условия для резонанса среди членов ряда возникает сингулярная гармоника. Тогда за счёт неё (или вблизи выполнения этого условия) оказывается справедливым неравенство $|\mathbf{E}'_{ii^*}| \gg |\mathbf{E}'_{iT}|$ (поскольку возрастание точного решения лимитируется параметром нелинейности).

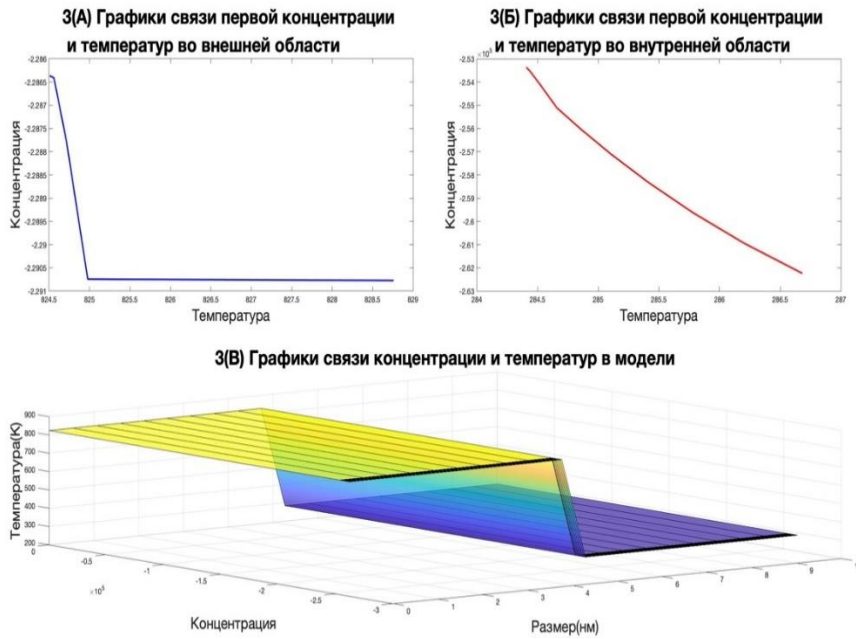


Рисунок 2. Графики связи концентрации и температур в модели.

Следовательно, $q_i \sim |E_{il}'^*|^2$, l номер резонансной гармоники. В диссертации получены решения для температуры в сферической и бисферической системах координат. Решения являются достаточно громоздкими. Так, например, для двухслойной сферической частицы решение имеет вид:

$$\tau_1 = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(1)} r^n P_n(\cos \theta) - \frac{w}{2\chi_{10}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} I_{n_1} \int_0^r |E_r^*(\hat{k}^{(1)} S)|^2 \left(-\frac{s^{n+2}}{r^{n+1}} + \frac{r^n}{s^{n-1}} \right) ds + \sum_{n=0}^{\infty} (I_{n_2} - 2I_{n_3} + I_{n_4}) \times \int_0^r |E_\theta^*(k^{(1)} S)|^2 \left(-\frac{s^{n+2}}{r^{n+2}} + \frac{r^n}{s^{n-1}} \right) ds \right] P_h(\cos \theta) \quad (19)$$

Здесь $\tau_1 = \int_{T_0}^T \tilde{\chi}_1 dT_1$, $C_n^{(1)}$ - коэффициенты, определяемые из граничных условий, w - коэффициент в формуле (9) перед квадратом модуля электрического вектора, $E_{i\varphi}'^* = 0$, I_{n_k} - интегралы, содержащие произведения трёх полиномов Лежандра, которые могут найдены с помощью формулы Гонга или обобщённой формулы Гонга. Анализ полученных результатов показал, что вследствие резонансного коэффициента A_1 при $m=2$ разогрев происходит и во второй области, хотя $q_2 = 0$. Важное значение имеет зависимость коэффициентов теплопроводности от температуры, которая может быть различной для $\tilde{\chi}_1(T)$ и $\tilde{\chi}_2(T)$.

В частности, может возникнуть ситуация, когда в одной из областей температура очень сильно возрастает, а в другой стабилизируется, несмотря на резонансные условия. Если стабилизация происходит во внешней области, то имеется некоторая аналогия с режимами обострения, которые возникают при моделировании теплопереноса нелинейным параболическим уравнением. Возможна также ситуация, когда в зависимости от разных веществ во внутренней и внешней областях, температура возрастает во внешней области, а в области №1 она стабилизируется. Возникновение различных ситуаций даёт возможность управления в таких системах.

Для эффективного моделирования предложен численно-аналитический метод определения температуры дисперсной системы в электромагнитном поле, особенностью которого является выделение резонансной гармоник. С помощью данного метода и разработанного алгоритма определяется температура в двухслойной частице и в двух близко расположенных частицах с нелинейными теплофизическими и оптическими свойствами. В методе численно определяются резонансные размер и частота, проводится расчёт интегралов, входящих в решение, учитывается число Кнудсена, определяются коэффициенты поглощения для двух частиц с использованием метода усечений, проводится уточнение решений методом итераций.

Параметр электродинамической нелинейности и размер внутренней области могут выступать в качестве управляющих параметров для теплопереноса и, в случае наличия диффузии или (и) реакции и массопереноса в системе. Кроме того, возникновение электромагнитного резонанса и нагревание частицы может привести к изменению величин оптических и теплофизических характеристик, потенциально переводя реакцию из режима активации в режим, не зависящий от температуры, к локализации температуры, распространению резонанса по полидисперсной системе.

В четвертой главе применены методы теории перколяции для моделирования фазовых переходов в ограниченных областях. Рассмотрен возможный анализ фазового перехода первого рода с использованием р-адического подхода.

При рассмотрении фазовых переходов вида «жидкость – газ» важную роль играет число Кнудсена $Kn = \frac{\lambda}{L}$, где λ – средняя длина свободного пробега газовых молекул, L – характерный размер объекта. Число Кнудсена можно использовать для определения степени разрежения потока молекул. Для такой оценки вводятся следующие границы:

1. $Kn < 0.01$: континуальный режим;
2. $0.01 < Kn < 0.1$: режим со скольжением;
3. $0.1 < Kn < 10$: переходный режим;
4. $Kn > 10$: свободномолекулярный режим.

Далее в этой главе предложена модификация алгоритма Хошена – Копельмана, применяемого для моделирования динамики в неупорядоченной среде. Модификация предложена для описания испарения в слое, находящемся непосредственно вблизи поверхности испарения. В частности, узлы могут быть заданы как для дерева Кейли. При этом вершины деревьев Кейли располагаются на границе раздела, представляя собой динамические узлы для молекул, от которых идёт построение узлов в жидкой (Γ_-) или газовой (Γ_+) фазах. В частности, можно проводить рассмотрение только газовой фазы (приповерхностная область). Также можно рассматривать решётку с ячейками. Модификация заключается во введении в алгоритм числа Кнудсена и узлов или ячеек, в которых находятся или не находятся молекулы газа или испаряющегося вещества. Узлы расположены друг от друга на расстоянии числа Кнудсена $\frac{Kn}{2}$. Соответственно, при рассмотрении ячеек – это их характерный размер. Поскольку длина свободного пробега зависит от температуры, то $Kn = Kn(T)$. Заполнение пустых узлов (ячеек) молекулами пара происходит с

вероятностью $\tilde{q}_v = f_s(\gamma, T)g_2(x)$, где $\gamma = \frac{v}{v_{max}}$, $f_s(\gamma, T)$ - функция распределения частиц по скоростям, $g_2(x)$ – корреляционная функция.

В частности, для максвелловского распределения молекул $\tilde{q}_v = \frac{p_s}{p_s+p_0} \frac{4}{\pi^2} e^{-\frac{4}{\pi}} g_r(x)$, где p_0 – давление окружающего газа, $p_s = p_s(T)$ – давление насыщенного пара над поверхностью жидкости, $g_r(x)$ – радиальная парная корреляционная функция. Соответственно, при таком же распределении по скоростям вероятность заполнения узлов или ячеек для молекул газа равна $\tilde{q}_v = \frac{p_0}{p_s+p_0} \frac{4}{\pi^2} e^{-\frac{4}{\pi}} g_r(x)$. Выбранная высота для проведения расчётов в области газа l_2 рассчитывается по максимальной скорости, $l_2 = v_{max}\Delta t$, где Δt – единица времени.

Сформулируем основные шаги алгоритма при заданном числе Кнудсена:

- если у текущего узла нет соседних занятых узлов, он считается новым кластером и получает новую метку k ;
- размер нового кластера фиксируется как $M(k_y) = 1$ или $M(k_v) = 1$ в зависимости от типа узла;
- если у узла только один занятый сосед с той же меткой, узлы объединяются в один кластер, и размер кластера увеличивается на 1: $M(k_y) = M(k_y) + 1$ для газа или: $M(k_v) = M(k_v) + 1$ для пара;
- если у узла несколько соседей одного типа, он объединяет их кластеры в один, получая общую метку и пересчитанный размер.;
- при наличии соседнего узла другого типа узел получает новую метку кластера;
- если у узла несколько соседей разных типов, предполагается, что он принадлежит новому кластеру и получает новую метку;
- суммирование проводится отдельно для узлов типа «пар» и «газ». Чтобы кластеры с разными метками объединить, их метки исправляются: в массивы M_g и M_v заносятся правильные метки со знаком минус.

Таким образом, можно рассмотреть структуру вблизи испаряющейся поверхности, что представляет большой интерес для моделирования фазового перехода. Соответственно, можно рассмотреть влияние на неё числа Кнудсена и температуры, вероятность достижения верхней границы в зависимости от \tilde{q}_v и от давления насыщенных паров p_s . При фиксированной температуре после неоднократного проведения вычислительных экспериментов можно получить наиболее вероятную структуру. Изменение плотности теплового источника приводит к изменению температуры (как было показано выше) и, следовательно, к изменению структуры приповерхностного слоя. В нестационарном случае изменение температуры со временем (третья глава) позволяет рассмотреть эволюционное изменение структуры приповерхностного слоя.

Другой подход для детального описания молекулярных траекторий в приповерхностном слое фазового перехода может быть рассмотрен с использованием р-адического анализа. Действительно, в работе Хренникова А. Ю. [Хренников А. Ю., 1993 г.] показано, что вероятность в р-адической метрике позволяет различать более тонкие эффекты, чем в вещественной метрике, в

которой они статистически неразличимы. При рассмотрении фазовых переходов это может касаться, например, числа частиц, покидающих поверхность испарения с очень большими скоростями. В 4 главе диссертации рассматривается подход, в котором, выбирая серии для молекул газа и испаряющегося вещества вблизи границы фазового перехода, можно определить p -адические вероятности, соответствующие стабилизирующимся частотам.

Для более общего подхода при моделировании фазового перехода первого рода можно применить p -адическую модель Поттса, в которой вводится квазигиббсовская мера. Пусть $\phi = \{0, 1, 2, \dots, q\}$, $q \geq 2$ является пространством состояний. В нашем случае состояния определяются температурами T_{ic} (конденсированная фаза) и T_{ig} (газовая фаза). Для моделирования связей между состояниями рассматривается древовидный граф. Вершины графа получают значения q , зависящие от температуры, с нумерацией в жидкой фазе по возрастанию температуры: $T_{ic} < T_{jc}$ для $i < j$. Рёбра в жидкой фазе показывают переходы между вершинами при изменении температуры. Аналогично для газовой фазы у поверхности. Граф обозначается как $\Gamma^K = \{V, L\}$. Вводится также множество $W_n = \{X \in V \mid |d(X, X^\circ)| = n\}$, где $d(x, y)$ – расстояние между вершинами x и y , X° – начальную вершину из множества V . Конфигурация σ на множестве вершин V задается как функция $\sigma: X \in V \rightarrow \sigma(X) \in \phi$. Конфигурации σ_n и ω_n определены на V_n и W_n . Объединение конфигураций σ_{n-1} и ω_n описывается по модели Поттса. Если в газовой фазе никаких дополнительных процессов не происходит, то простейший граф с вершинами q_{gi} при поверхностном слое q_{ci} более правильно представить графом, приведенном на втором рисунке 3. Он также является деревом. Здесь наклон рёбер обусловлен тем, что обычно в газовой фазе вблизи поверхности конденсированного вещества имеет место аккомодация и температура уменьшается.

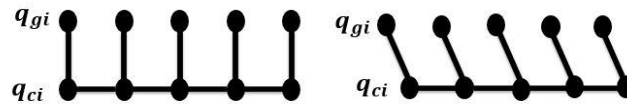


Рисунок 3. Пример графа $\Gamma_1^K(q_{ci}, q_{gi})$

Гамильтониан системы для модели Поттса имеет вид:

$$H(\sigma) = \mathcal{N} \sum_{(x,y) \in L_n} \delta\sigma(x), \sigma(y) \quad (20)$$

Здесь δ – символ Кронекера, \mathcal{N} – константа связи, $\sigma \in \Omega_{V_n}$, $\Omega_{V_n} = \Omega_{V_{n-1}} \times \Omega_{V_n}$, множество всех конфигураций, включающих вершины U_p совпадают с $\Omega = \phi^{U_p}$, то есть в нашем случае, $U_p = V_n$.

Функция распределения $f(x, t)$ молекул по траекториям с учетом их возможной диффузии может быть найдена с помощью оператора Владимирова. Оператор Владимирова является p -адическим аналогом оператора процессов диффузии и теплопереноса и имеет вид:

$$D_x^\gamma f(x, t) = \frac{1}{\Gamma_p(-\gamma)} \int_{Q_p} \frac{f(x) - f(y)}{|x - y|^{1+\gamma}} d\mu(y) \quad (21)$$

где $\Gamma(-\gamma) = \frac{p^\gamma - 1}{1 - p^{-1-\gamma}}$, $\mu(x)$ – мера Хаара. Соответственно уравнение диффузии имеет вид:

$$\frac{d}{dt} f(x, t) = -D_x^\gamma f(x, t) \quad (22)$$

Применение p -адической метрики приводит к некоторым новым моделям в виде графов, а вероятностная p -адическая мера показывает качественную возможность фазового перехода и соответственно нарушения внутренней структуры системы. Уравнение для функции распределения позволяет оценить динамику молекулярных траекторий вследствие диффузии. Поскольку в общем случае имеют место столкновения молекул в слоях газа при удалении от поверхности, то такую ситуацию можно моделировать одной из ветвей дерева. При этом эта ветвь разветвляется по тому же закону построения. Следовательно, в этом случае существуют различные квазигиббсовские меры. Это свидетельствует, как показано в работе [F. Mikhamedov, O. Khakimov Phase transition and chaos: P-adic Potts model on a Cayley tree // Chaos. Solitons and Fractals. – 2016. – № 87, P. 190–196]. о возможности фазового перехода.

В пятой главе описан алгоритм и разработан программный комплекс, основанные на модификации алгоритма Хошена - Копельмана. Проведены вычислительные эксперименты по тепло- и массопереносу для двухслойной частицы в поле электромагнитных волн * (в соответствии с алгоритмом, описанном в третьей главе) и анализу кластеров испаряющегося вещества в окружающий газ. Алгоритм использует три метки: 0 – пустая клетка, 1 – молекулы пара, 2 – молекулы газа. Определены число, размер и распределение кластеров. На рисунке 5 представлено одно из решений.

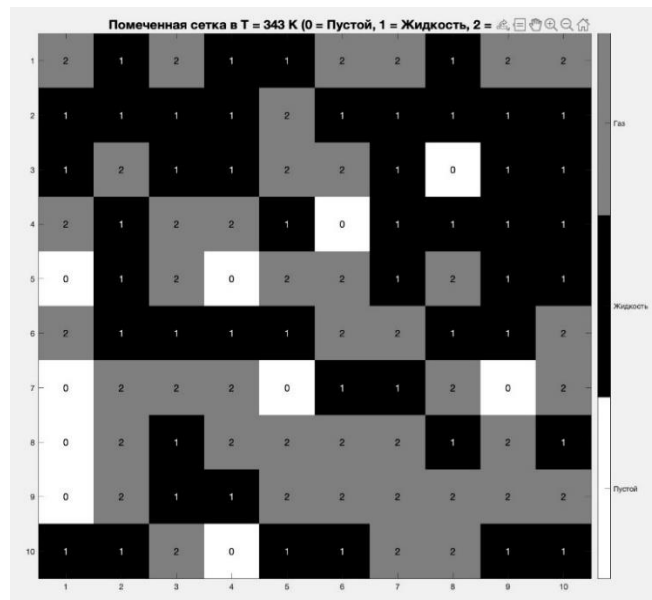


Рисунок 5. Распределение кластеров для модифицированного алгоритма Хошена-Копельмана при 343 К

Проведенное моделирование показало, что имеет место влияние температуры на структуру гетерогенного приповерхностного слоя вблизи границы фазового перехода. В частности, моделирование показало, что количество больших кластеров пара $n \geq 3$ по отношению к общему числу кластеров пара зависит от температуры.

При температуре $T=303$ К и при $T=323$ К такое отношение равно 0,222, а при $T=343$ К оно равно 0,364. Такое довольно большое изменение может быть объяснено тем, что при $T=343$ К для испарения молекул воды (для которых проводился расчёт) заметным становится конвективное движение смеси. При этом число Кнудсена (Кн) для пара и воздуха – 1.17×10^{-1} , что соответствует переходному режиму (по классификации Дерягина-Галояна-Яламова).

Полученные результаты могут быть использованы в таких областях, как материаловедение, химической инженерии, нанотехнологиях и др.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Выполнена научно-квалификационная работа, решающая актуальную задачу моделирования фазовых переходов и нелинейного теплопереноса в мезо- и наносистемах под воздействием электромагнитного поля. Решаемая задача имеет важное фундаментальное значение для развития такой отрасли знаний как прикладная математика и прикладное значение, например, для приборостроения и нанотехнологий.

2. На основе обзора литературы и её анализа показано, что, несмотря на достаточно хорошо изученные закономерности фазовых переходов первого рода, развитие подходов на основе современных математических методов для исследования нелинейных процессов тепло- и массопереноса и фазовых переходов под действием электромагнитного поля и в непосредственной близости от границы раздела фаз имеет высокую значимость.

3. Для определения особенностей теплопереноса и фазовых переходов первого рода в электромагнитном поле предложена математическая модель для определения условий возникновения электромагнитного резонанса, отличающаяся возможностью учитывать нелинейную зависимость диэлектрической проницаемости от электрического вектора. Показано отличие условия возникновения резонанса в оптически нелинейной среде от условий линейной теории. Получены условия возникновения резонанса в оптически нелинейных двухслойных сферических частицах, а также условия для определения величины взаимного влияния близко расположенных дисперсных частиц на условия возникновения резонанса через коэффициенты поглощения и рассеяния, входящие в решения в виде рядов.

4. Найдены плотности тепловых источников вблизи условий возникновения электромагнитного резонанса в зависимости от размера частиц и физических характеристик вещества. С использованием нелинейного уравнения теплопроводности с найденными тепловыми источниками, зависящими от параметра оптической нелинейности, разработан численно-аналитический метод определения температуры в дисперсной системе в нелинейном электромагнитном поле, особенностью которого является выделение резонансной гармоник.

5. На основе разработанных модели и метода выявлены закономерности и особенности индуцированного теплопереноса в двухслойных мезо- и наносистемах, а также в системе с двумя сферическими частицами, взвешенными в континуальной среде, с различными оптическими и

теплофизическими свойствами. Показано, что в общем случае имеет место качественное различие зависимостей температуры от координат в разных областях рассматриваемых систем, обусловленное видом температурной зависимости коэффициентов теплопроводности. В частности, может иметь место стабилизация температуры в одной из областей, несмотря на электромагнитный резонанс. Показана возможность распространения электромагнитного резонанса по полидисперсной системе в процессе её нагревания. В двухслойной сферической частице (размер внешней области значительно превышает размер внутренней области) рассмотрен массоперенос вида «диффузия -реакция», обусловленный нагреванием вследствие воздействия электромагнитного поля. Показано, что при электромагнитном резонансе массоперенос происходит с переходом от активационного режима к режиму с температурно-независимой скоростью реакции. Показана также возможность возникновения барьерного эффекта для концентрации вблизи границы перехода из внутренней во внешнюю область.

6. Для моделирования фазового перехода первого рода в приповерхностном слое разработана модификация перколяционного алгоритма Хошена – Копельмана. В модификацию включено число Кнудсена с целью рассмотрения различных режимов испарения, а также три состояния ячеек: 0-пустая ячейка, 1-испаряющееся вещество, 2-окружающий газ. Заполнение ячеек происходит с использованием зависящей от температуры функции распределения по скоростям. Проведение моделирования показало, что с увеличением температуры увеличивается процент более длинных кластеров, соответствующих молекулам испаряющегося вещества.

7. Предложена модель фазового перехода первого рода для системы «жидкость-газ» в ограниченной области вблизи поверхности испарения мезо- или наноструктуры, особенностью которой является использование древовидных графов состояний, зависящих от температуры, на поверхности испарения и для газовой фазы вблизи поверхности фазового перехода. С использованием построенной модели предложен подход применения р-адического анализа и модели Поттса для выявления деталей фазовых переходов первого рода в высокодисперсных системах и определения энтропии. Подход опирается на статистическое понятие вероятности в р – адическом анализе и квазигиббсовскую меру.

8. На основе разработанных моделей, метода и алгоритмов с использованием ПО MatLab r2021a создан комплекс программ, позволяющий проводить вычисления температуры, концентрации, молекулярных траекторий в высокодисперсных системах при переходе «жидкость – газ» под воздействием электромагнитного поля.

9. Результаты, полученные в диссертации, рекомендуется использовать в учебном процессе в вузе при подготовке бакалавров и магистров по таким направлениям как «Информатика и вычислительная техника», «Прикладная математика», «Прикладная информатика», «Физика и технология наноструктур», «Лазерная техника и лазерные технологии».

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи, опубликованные в журналах, входящих в перечень ВАК:

1. Уварова, Л. А. Моделирование процесса переноса “реакция – диффузия” в нелинейном электромагнитном поле / Л. А. Уварова, Пхью Вэй Лин // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия: Физико-математические науки. – 2021. – Том 25. – №. 4. – С. 663–675.

2. Уварова, Л. А. Электромагнитный резонанс и индуцированные эффекты в дисперсных системах / Л. А. Уварова, Пхью Вэй Лин, И. В. Кривенко // Журнал «Перспективы науки», Тамбов. – 2023. – № 10(169), – С. 35–50. – ISSN 2077–6810.

Статьи, опубликованные в журналах, входящих в перечень SCOPUS:

3. Uvarova, L. A. Modeling of the “Reaction – Diffusion” Transfer Process in the Nonlinear Electromagnetic Field / L. A. Uvarova, Phyow Wai Linn // Journal of Numerical Analysis, Industrial and Applied Mathematics, 2022. – Vol. 2425. Issue.1. AIP Conf. Proc. 2425, 100003. URL: [10.1063/5.0081638](https://doi.org/10.1063/5.0081638).

В других изданиях:

4. Уварова, Л. А. Р-адический анализ динамической системы и явление энтропии / Л. А. Уварова, П. В. Лин // Инновации и инвестиции. – 2020. – №.3. – С. 229 – 231.

5. Уварова, Л. А. Моделирование фазовых переходов на основе Р-адического анализа и дерева Кэйли / Л. А. Уварова, Пхью Вэй Лин // Инновации и инвестиции. – 2020. – № 7. – С. 137–142.

6. Пхью Вэй Лин. Р-адическая динамическая система и её приложения / Пхью Вэй Лин, Л. А. Уварова // Сборник тезисов 4-й международной научной конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем», Москва. 15–17 октября 2019 г. – С. 160–161.

7. Пхью Вэй Лин. Р-адическая динамическая система и её приложения / Пхью Вэй Лин, Л. А. Уварова // Сборник тезисов 4-й международной научной конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем», Москва. 15–17 октября 2019 г. – С. 160–161.

8. Пхью Вэй Лин. Исследование на основе динамических систем р-адического анализа / Пхью Вэй Лин, Л. А. Уварова // Сборник тезисов 27-й международной конференции «Математика, компьютер, образование», Дубна. 27 января –1 февраля 2020 г. – С. 152.

9. Уварова. Л. А. Моделирование фазового перехода первого рода через наноструктуру на поверхности раздела / Л. А. Уварова, Пхью Вэй Лин, А. В. Соколов // Материалы конференции международной конференции «Самарские чтения (в память об академике А. А. Самарском)», Москва. – 2022. – С. 236.

10. Уварова. Л. А. Дискретно-континуальное моделирование фазовых переходов с использованием графов / Л. А. Уварова, Пхью Вэй Лин // Материалы конференции 6-й международной научной конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем», Москва. – 2023 г. – С. 307.

11. Phyow Wai Linn. Modification of the percolation algorithm by considering the liquid-gas phase transition / Phyow Wai Linn // Материалы конференции 7-ой международной научной конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем», Москва. – 2024. – С. 30.