УДК 523-52

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПЫЛЕВЫХ ФРАКТАЛЬНЫХ КЛАСТЕРОВ В ПРОТОПЛАНЕТНЫХ ГАЗОПЫЛЕВЫХ ДИСКАХ

© 2021 г. А. В. Русол*

Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва, Россия

**e-mail: fermata@inbox.ru* Поступила в редакцию 02.06.2020 г. После доработки 14.12.2020 г. Принята к публикации 24.02.2021 г.

Современные модели образования планетных систем, построенные с учетом доступных данных о газопылевых протопланетных дисках, включают непрерывно усложняющиеся методы компьютерного моделирования разнообразных процессов, среди которых важная роль принадлежит изучению взаимодействия пылевых частиц в диске, происходящих на масштабах от долей миллиметров до десятков и более сантиметров. Важными исходными условиями для их описания являются параметры распределения частиц по составу и размерам. Одной из актуальных задач является построение моделей пылевых кластеров, формирующихся в протопланетных дисках, с учетом существующих космохимических и физических ограничений. В данной работе основное внимание уделено методическим вопросам моделирования внутренней структуры пылевых фрактальных кластеров на основе теоретических подходов, в которых использован предложенный ранее эффективный метод проницаемых частиц. Реализован подход, позволяющий учитывать полидисперсность и гетерогенность состава твердотельной компоненты протопланетного диска. Данная методика использует следующие входные параметры модели: диапазоны распределения исходных частиц по размерам, фрактальную размерность образующихся кластеров, массовые доли ледяных и тугоплавких частиц. Автором разработано программное обеспечение для численной реализации соответствующих модельных задач.

Ключевые слова: протопланетный диск, пылевые агрегаты, фрактальные кластеры, метод проницаемых частиц, численные расчеты

DOI: 10.31857/S0320930X21030075

введение

Исследование процессов зарождения и эволюции Солнечной системы и планетных систем у других звезд относится к фундаментальным проблемам современного естествознания. Одним из ключевых этапов решения задач подобного класса является построение детальных геометрических моделей внутренней структуры пылевых кластеров. Такие модели позволяют исследовать процессы их уплотнения и разрушения и одновременно роста первичных твердых частиц в ходе эволюции протопланетного газопылевого диска. Ранние модели, описывающие образование крупных допланетных тел как непрерывное укрупнение пылевых частиц в процессе соударений, являются крайне упрощенными и не подкрепляются экспериментальными данными. Физически более обоснована крупномасштабная модель объединения первичных пылевых сгущений, образующихся вследствие фрагментации уплотненного газопылевого субдиска за счет механизма потоковой и гравитационной неустойчивости (Youdin, Goodman, 2005; Маров и др., 2008; 2013; Marov, 2018: Колесниченко, Маров, 2019). В работе (Колесниченко, Маров, 2013) было предложено и обосновано представление о фрактальной природе пылевых кластеров, обеспечивающих эффективный рост частиц при столкновениях. В работе (Маров, Русол, 2011) предложен подход к численному моделированию столкновительной динамики, дальнейшее развитие которого позволило провести модельные расчеты (Marov, Rusol, 2015а; 2015b; Маров, Русол, 2018) для нано- и микроразмерных частиц. Однако значительные трудности возникают при моделировании процессов роста и разрушения пылевых фрактальных кластеров и рыхлых тел на мезо-масштабах от субмиллиметрового до метрового диапазона. На таких масштабах размеров и масс гравитационное взаимодействие практически не влияет на характер процессов, происходящих при столкновениях или тепловых воздействиях, но значительно ослабевает роль электростатических взаимодействий. Основным управляющим параметром в данном случае является внутренняя структура исследуемых тел, так как высокая пористость оказывает существенное влияние на их механические и теплофизические свойства.

Проблеме изучения агломератов с фрактальной внутренней структурой и их эволюции посвяшен целый ряд исследований. Происхождение и состав пылевой компоненты во фрактальных пылевых кластерах межзвездных облаков, а также основных химических и физических процессов, управляющих ее эволюцией, включая оптические свойства пылевых графитовых агрегатов со случайной фрактальной структурой рассматривались в работах (Tielens и др., 1987; 2005; 2011; Wright, 1987; 1989). Влияние характеристик взаимодействия отдельных частиц на устойчивость и разрушаемость пылевых агломератов исследовалось (Dominik и др., 1995). Изучению структуры и эволюции фрактальных агрегатов в плазме посвяшена работа (Matthews и др., 2004), в которой предложена модель аппроксимации распределения заряда и дипольного момента в кластерах пылевой плазмы, а также показано, что рост агрегатов в пылевой плазме приводит к образованию удлиненных рыхлых структур. Результаты численного моделирования процессов уплотнения и разрушения пылевых агрегатов при столкновениях содержатся в работах (Wada и др., 2007) для двумерного случая и (Wada и др., 2008) – для трехмерного. Условия столкновений пылевых агрегатов, обеспечивающие их рост, исследовались (Wada и др., 2009). Влиянию формы начальных частиц на процессы кластер-кластерной агрегации посвящена работа (Perry и др., 2012), в которой было показано, что отклонение формы мономеров от сферической существенно влияет на компактность "упаковки" результирующих кластеров. Исследованию процессов уплотнения и разрушения фрактальных кластеров при столкновениях посвящена работа (Ringl и др., 2012). В ней проведено исследование столкновительной эволюции кластеров в рамках механики гранулированных сред и показано, что на характеристики результирующих агломератов оказывают существенное влияние относительные скорости и параметры столкновений. Механизмы, приводящие к уплотнению рыхлых "флаффированных" пылевых агрегатов, для широкого диапазона масс и физических условий изучались в работе (Kataoka и др., 2013). Работа (Johansen и др., 2014) представляет собой обзор условий, процессов и объектов, игравших существенную роль при формировании Солнечной системы. На Международной

космической станции (МКС) с 2014 по 2016 год проводился эксперимент NanoRocks, целью которого было исследовать низкоскоростные столкновения между частицами в диапазоне размеров 0.1-1 мм. Было показано (Brisset и др., 2019), что при парных столкновениях частица-частица слипание происходит на скоростях около 1 см/с. Диссипация энергии и фрагментация при столкновениях полидисперсных зернистых кластеров исследовались на численных моделях (Umstätter, Urbassek, 2020). Численное моделирование показало, что при использовании степенного распределения по размерам с показателем около 3.5 (распределения Mathis-Rumpl-Nordsieck (MRN)) и монодисперсных по размерам частиц приблизительно соответствующими среднему геометрическому значению наибольшего и наименьшего радиусов распределения MRN, результаты оказываются близкими. При исследовании движения пористых пылевых агрегатов под действием светового давления в протопланетных газопылевых дисках (Tazaki, Nomura, 2015) было показано, что крупные компактные частицы, богатые кальцием и алюминием, с трудом переносятся во внешнюю область под давлением звездного излучения, тогда как пористые пылевые агрегаты эффективно транспортируются из внутренней горячей области во внешнюю холодную область протопланетной туманности. Оптические свойства высокопористых пылевых агрегатов исследовались в работе (Tazaki и др., 2016). В работе (Ishihara и др., 2018) было исследовано влияние турбулентных движений газа на процессы коагуляции пылевых частиц и образования планетезималей. Было показано, что турбулентная кластеризация играет значительную роль в росте сантиметровых компактных агрегатов (pebbles), а также увеличивает концентрацию твердого вещества, что может привести к образованию потоковой неустойчивости (streaming instability) в диске.

В данной работе основное внимание уделено методическим вопросам моделирования внутренней структуры пылевых фрактальных кластеров на основе теоретических подходов, развитых в работах (Колесниченко, Маров 2013; 2019; Магоv, 2018) и ранее разработанных моделей (Маров, Русол, 2011; 2018; Marov, Rusol, 2015а; 2015b), в которых использован предложенный автором эффективный метод проницаемых частиц.

Под имитационным моделированием понимается подход, в рамках которого проводится восстановление геометрической структуры пылевых фрактальных кластеров на заключительной стадии процесса формирования, а не численное исследование процесса их роста из первичных пылевых агрегатов. Такой подход применяется в связи с необходимостью рассмотрения пылевых кластеров в широком диапазоне фрактальных размерностей. При значении фрактальной размерности превышающем 2.5 число частиц, составляющих кластер, исчисляется сотнями тысяч. Реализация прямого численного моделирования формирования даже одного такого кластера требует существенных вычислительных мощностей и временных затрат, что значительно осложняет планируемое исследование, сопряженное с массовыми расчетами.

ИСХОДНАЯ МОДЕЛЬ

Была разработана методика моделирования внутренней структуры пылевых фрактальных кластеров, состоящих из частиц, различающихся по составу вещества. При этом частицы разных типов вещества могут иметь отличающиеся диапазоны распределения диаметров, а также собственную фрактальную размерность. Исследуемый кластер имеет несколько ключевых параметров:

• диаметр кластера, он же диаметр охватывающего объема — объема содержащего центры всех частиц, составляющих кластер;

• фрактальная размерность кластера;

• количество сортов частиц;

• массовая доля частиц каждого сорта в кластере;

• диапазоны диаметров для частиц каждого сорта.

Процедура построения структуры кластера может быть описана следующим образом:

• задается радиус и фрактальная размерность формируемого кластера;

• задается массовые доли и диапазоны размеров частиц каждого сорта;

• определяется медианный размер частиц (по всем заданным диапазонам);

 по медианному размеру определяется число частиц для монодисперсного кластера заданного радиуса и фрактальной размерности;

 по заданным массовым долям формируются массивы частиц каждого сорта: положения для частиц вычисляются в соответствии с набором 3D сплайнов, число и геометрия которых определяются фрактальной размерностью формируемого кластера;

• формируется полидисперсный кластер с полученным числом частиц, причем каждая конкретная частица выбирается из массива частиц определенного сорта случайным образом, но с учетом весовых долей сортов.

Данная процедура позволяет получить кластер, сформированный из пылевых агломератов протяженного пространственного строения.

Образование таких протяженных пространственных агломератов ранее исследовалось в работах (Маров, Русол, 2011; 2018; Marov, Rusol, 2015а; 2015b), на основе метода проницаемых частиц. В рамках данной модели неделимые сферические частицы первого уровня описывают не объемы заполненные сплошным веществом, а фрактальные агрегаты, занимающие соответствующий сферический объем, пористость которых характеризуется их индивидуальной фрактальной размерностью. Более крупные композиции таких частиц образуют кластеры и их фрагменты. Характерной особенностью метода проницаемых частиц, является то, что при рассмотрении составных агрегатов не проводится осреднение свойств по набору частиц, т.е. каждая частица сохраняет свои свойства на протяжении всего процесса моделирования.

Такая модель, в частности, может быть полезна при рассмотрении распада пылевых кластеров при сублимации H_2O на линии водяного льда в протопланетном диске, если ледяная компонента в пылевом кластере сконцентрирована в частицах, состоящих преимущественно из льда H_2O (Маров и др., 2021).

Распределение частиц по размерам. При моделировании внутренней структуры пылевых фрактальных кластеров в первую очередь необходимо дать описание распределения модельных частиц по их диаметрам. Монодисперсные модели, хотя и являются менее требовательными к вычислительным ресурсам, существенно огрубляют описание внутренней структуры и поведения пылевых агрегатов. Поэтому в данной работе принята к рассмотрению полидисперсная модель распределения частиц по диаметрам. Среди множества существующих распределений случайных величин, отличающихся от равномерного, при моделировании природных сред и процессов наиболее применимыми являются распределения Гаусса, равномерное и обратное степенное. В дальнейшем, не нарушая общности алгоритма моделирования, будет рассмотрено применение только обратного степенного распределения.

Для распределения тел по массам и радиусам (Сафронов, 1969) $n(M)dM = cM^{-q}dM$; $n(R)dR = c_1R^{-p}dR$, где n(M)dM и n(R)dR число тел в единице объема с массами в интервале (m, m + + dm) и радиусами в интервале (R, R + dR), с и c_1 – нормирующие множители, имеем p = 3q - 2. Степенной закон распределения кратеров (как и межзвездных пылевых частиц) по размерам дает значение $p \approx 3.5$ и значение $q \approx 1.8 \approx 11/6$ (Сафронов, 1987).



Рис. 1. Диаграммы распределения частиц по относительным диаметрам (d/d_{max}) согласно обратному степенному за-кону.

Такое распределение наиболее часто встречается в астрономических наблюдательных данных. В качестве объекта исследования представлен кластер, образованный полидисперсными частицами двух типов, один из которых - "ледяные" частицы, состоящие преимущественно из льда воды, а частицы другого типа можно условно назвать "тугоплавкими", так как они в своем составе помимо силикатов содержат и другие компоненты, менее летучие, чем лед, включая сульфиды и органические соединения. При этом представлен только один случай, а именно, когда границы диапазона распределения диаметров ледяных частиц существенно превосходят соответствующие характеристики распределения тугоплавких частиц. Однако отношение граничных значений диапазонов распределений было принято равным

3 для обоих типов частиц, т.е. ширина диапазонов распределения одинакова. Для сравнения характеристик наборов частиц были получены распределения 10⁵ частиц по диаметрам в диапазонах

- для ледяных части от 0.05 до 0.15 см;
- для тугоплавких частиц от 0.015 до 0.045 см.

Для демонстрации изменения характера распределения показатели степени рассматривались в диапазоне от 1.0 до 10.5. Поведение распределения на качественном уровне совпадает для ледяных и тугоплавких частиц, так как определяющим фактором является ширина диапазона размеров. Поэтому представляется целесообразным отобразить зависимость плотности распределения не от абсолютных размеров частиц, а от относительного диаметра d/d_{max} , т.е. отношения теку-

РУСОЛ



Зависимость массовой доли крупных и мелких ледяных частиц от показателя степени распределения

Рис. 2. Зависимость массовых долей ледяных частиц от показателя степени распределения для обратного степенного закона.

щего диаметра к максимальному диаметру в распределении частиц (рис. 1).

Как видно из рис. 1 в случае использования обратного степенного закона распределение частиц по диаметрам тяготеет к более мелким частицам. И характер распределения существенно зависит от показателя степени распределения.

При проведении численного моделирования пылевых кластеров представляет интерес влияние показателя степени обратного степенного распределения на массовые характеристики частиц. Для количественной оценки можно рассмотреть зависимость массовых долей крупных и мелких ледяных частиц от степени распределения (рис. 2). Под "крупными" будем понимать частицы с размерами больше среднего арифметического значения, а под "мелкими" – меньше среднего арифметического.

Характерным признаком степенных распределений является выраженная зависимость массовой доли мелких и крупных частиц от показателя степени и ширины диапазона изменения диаметров. Еще одним важным с прикладной точки зрения параметром является суммарная масса частиц меньших и больших некоторого заданного размера. На рис. 3 представлены такие зависимости при нескольких характерных показателях степени обратного степенного распределения. Учитывая свойства полученных распределений, зависимости отображены в относительных координатах, т.е. относительные диаметры, как и на рис. 1, и относительные суммарные массы $(M_{\Sigma}/M_{\Sigma}^{full})$: где M_{Σ} – суммарная масса частиц больших или меньших размеров, M_{Σ}^{full} – полная суммарная масса частиц.

Как видно из рис. 3, в каждом конкретном случае в распределении частиц может быть выделен некоторый медианный по массе диаметр частицы, т.е. такой диаметр частицы, для которого суммарная масса меньших частиц и суммарная масса больших частиц равны. Так же приведенные графики показывают, что с ростом показателя степени обратного степенного распределения величина такого медианного по массе диаметра падает.

По данным наблюдений межзвездной пыли, кратеров на небесных телах и некоторых других природных процессов и явлений можно сделать выбор параметров для распределения частиц по диаметрам в пользу обратного степенного закона с показателем степени 3.5.



Рис. 3. Зависимость относительной суммарной массы меньших и бо́льших ледяных частиц $(M_{\Sigma} / M_{\Sigma}^{full})$ от относительного диаметра (d/d_{max}) рассматриваемой частицы.

Распределение частиц во внутреннем пространстве кластера. При моделировании внутренней структуры пылевых фрактальных кластеров используются алгоритмы построения 3D-сплайнов, реализованные в пакете SciPy вычислительной платформы Python. По заданной фрактальной размерности кластера определяется необходимое число точек интерполяции, распределенных во внутреннем пространстве его охватывающего объема. В данной работе принята следующая зависимость числа точек *n* от фрактальной размерности кластера D_{β}

$$n = \frac{4.0D_{\beta}}{d - D_{\beta}},\tag{1}$$

где d — размерность пространства, в котором проходит моделирование. Следующим параметром является необходимое количество ветвей N_{br} , заполняющих пространство кластера, также зависящее от его фрактальной размерности D_{β}

1

$$N_{br} = \left\lfloor \frac{2.0}{d - D_{\beta}} \right\rfloor,\tag{2}$$

где $[\cdot]$ — обозначает операцию взятия целой части от величины отношения. После этого для каждой ветви генерируются случайные распределения *n* точек интерполяции, по которым и строится соответствующий сплайн. Полученный таким образом набор допустимых координат центров частиц используется в дальнейшем для формирования итогового кластера.

Модель проницаемых частиц. При рассмотрении задач, в которых существенную роль играют контактные взаимодействия модельных частиц и тел между собой, возникает необходимость учета процессов в зоне контакта. При этом распределение энергии по процессам, происходящим в зоне контакта, регламентируется преобладающими явлениями (рекомбинация внутренней структуры, химические процессы и пр.). В рассматриваемой модели задача детального учета межчастичного

взаимодействия в зонах контакта модельных частиш не ставилась, что может быть обосновано существующей неопределенностью относительно исходного состава и свойств частиц в протопланетном диске. В данной постановке при моделировании контактных взаимодействий частиц, составляющих кластеры, производится суммарная оценка потери энергии при столкновении, что отвечает значению коэффициента восстановления в методе проницаемых частиц. В данной работе проводится рассмотрение кластеров, в которых объемный (пространственный) заряд отсутствует. Однако в полной постановке задачи контактного взаимодействия модельных частиц в пылевых фрактальных кластерах следует учитывать эффекты, связанные с возникновением электрических зарядов разных знаков, их диффузией, распределенным потенциалом электрического поля. В целом картина соответствует процессам, происходящим в пылевой плазме, характеризуемой состоянием квазинейтральности и возникновением напряженности поля при разделении зарядов. Один из методов аппроксимации распределения заряда при эволюции фрактальных агрегатов в кластерах пылевой плазмы рассмотрен в работе (Matthews, Hyde, 2004), a pacпределение зарядов на плотных частицах и влияние электростатического барьера на процессы их объединения в работах (Ivlev, Akimkin, Caselli, 2016) и (Akimkin, Ivlev, Caselli, 2020). В общем случае, вопрос о заряде пылевых фрактальных кластеров и влиянии на нее фрактальной размерности требует существенного усложнения задачи. Ее предполагается рассмотреть на последующих этапах усовершенствования модели.

Для обеспечения адекватности численной модели физическому поведению нейтральных частиц при контактных взаимодействиях, без существенного увеличения вычислительной сложности, предложено описание перераспределения энергии в зоне контакта, зависящее от свойств, размеров и внутренней структуры модельных частиц. При построении моделей различного пространственного масштаба в качестве основного управляющего параметра выступает либо плотность модельных частиц, принимаемых как сплошные и однородные тела, либо фрактальная размерность модельных частиц для моделей пористых тел, агломератов и кластеров с фрактальной внутренней структурой. Предложенный механизм позволяет, при необходимости, воспроизвести (промоделировать) распределение энергии по процессам в зоне контакта: тепловой выход, фазовые переходы, деформирование, разрушение и т.п.

В предложенной автором модификации метода частиц — *методе проницаемых частиц* — можно учесть внутреннюю структуру объектов и сложный характер их взаимодействия (Marov, Rusol, 2015а; 2015b). Суть данного подхода заключается в том, что, как при формировании начальных конфигураций, так и при контактных взаимодействиях, частицы могут образовывать пересечения. В рассматриваемой постановке задачи моделирования индивидуальные модельные частицы, составляющие крупные пылевые кластеры, представляют собой мелкие агломераты, так же имеющие фрактальную внутреннюю структуру. Степень взаимного проникновения модельных частиц обусловлена их фрактальной размерностью. Частицы с фрактальной размерностью ~2.025-2.25 при контактных взаимодействиях могут занять один охватываюший объем, т.е. при сохранении размера более крупной частицы произойдет изменение ее внутренней структуры, фрактальной размерности и массы. В то же время, "плотные" частицы с фрактальной размерностью ~2.75-2.975 при взаимодействиях могут образовывать малые зоны практически "точечного" контакта.

Предложенный подход позволяет при моделировании, например, сред, состоящих из пылевых кластеров использовать индивидуальные модельные частицы для описания кластеров в начальный момент времени и проследить постепенное образование и эволюцию более крупных структур.

Определение фрактальной размерности пылевых структур. Фрактальная размерность позволяет количественно оценить то, как вещество кластера заполняет охватывающий объем. Важно подчеркнуть, что математические фрактальные объекты в геометрическом смысле обладают рядом свойств, которых не может быть у физических объектов с фрактальной структурой. Например, получаемый с помощью системы итерируемых функций фрактальный объект "губка Менгера" (см., напр., Кроновер, 2000; Морозов, 2002) в пределе имеет нулевой объем и является самоподобным на любом шаге построения. Физические объекты с фрактальной внутренней структурой не могут обладать нулевым объемом, а свойство самоподобия может быть только у создаваемых искусственно структур, например, у мультиволновых антенн. Еще одной отличительной особенностью фрактальных объектов, таких как кластеры, возникающие при ограниченной диффузией агрегации (diffusion limited aggregation – DLA), является то, что при удалении от центра агрегации плотность заполнения пространства веществом уменьшается. На рис. 4 представлены два варианта пылевых фрактальных кластеров.

В теории фрактальных кластеров предложен ряд соотношений для описания их свойств (см., напр., Смирнов, 1991). Однако такие соотношения,



Рис. 4. Монодисперсные пылевые фрактальные кластеры.

вполне применимые для монодисперсных объектов, в случае объектов с размерами частиц, случайным образом распределенными в некоторых диапазонах, дают лишь приближенные оценки параметров.

По завершению процесса формирования кластера появляется возможность оценки его фактической фрактальной размерности. Если фактическое число частиц в кластере N_{cl} , суммарный объем частиц кластера V_{Σ} и радиус кластера R_{cl} , то условный средний радиус частиц может быть определен соотношением

$$r_{mean} = \frac{1}{2} \left[\frac{6}{\pi} \frac{V_{\Sigma}}{N_{cl}} \right]^{\frac{1}{3}},\tag{3}$$

а фактическая фрактальная размерность кластера

$$D_{\beta} = \frac{\lg(N_{cl})}{\lg\left(\frac{R_{cl}}{r_{mean}}\right)}.$$
 (4)

Предложенные зависимости позволяют оценить фрактальную размерность полученного кластера, так для монодисперсного кластера, показанного на рис. 46, заданная размерность 2.975, а фактическая, полученная по соотношениям (3) и (4), размерность 2.9736. Конечно, в случае полидисперсных кластеров, рассматриваемых далее, совпадение размерностей будет не таким близким.

Предложенный в данной работе алгоритм позволяет моделировать пылевые фрактальные кластеры, состоящие из любого числа сортов частиц, имеющих индивидуальное для каждого сорта распределение по размерам. Такой подход позволяет проводить исследование эволюции твердотельной компоненты газопылевых протопланетных дисков с учетом особенностей химического строения ее вещества. Используемый вариант формирования итоговой композиции частиц путем случайного выбора из массивов, сформированных по медианным радиусам частиц при заданном степенном распределении, с последующей заменой на полидисперсные значения размеров частиц, приводит к погрешности массовых долей сортов частиц и фрактальной размерности. Однако этот эффект существенно затухает с ростом фрактальной размерности, так как при большом количестве частиц происходит статистическое "сглаживание" и массовых долей, и распределения частиц во внутреннем пространстве кластера.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ПЫЛЕВЫХ ФРАКТАЛЬНЫХ КЛАСТЕРОВ

Модельные частицы, в используемом методе проницаемых частиц, описывают не сплошную среду со свойствами вещества протопланетного диска, а имеющий существенную пористость пылевой агломерат меньшего размера, поэтому плотность модельных частиц принята следующей: для "тугоплавкого" (труднолетучего) вещества – 1.4 г/см³, для льда воды – 0.5 г/см³. Это позволит описать свойства каменно-ледяных агломератов различной пространственной заполняемости, от весьма рыхлых флафированных до компактных "плотных" состояний. Предполагая наличие в агрегатах, представляемых модельными частицами, преимущественно тугоплавкой или ледяной составляющей, рассматриваются два сорта модельных частиц: "ледяных" и "тугоплавких" с указанными выше диапазонами диаметров.

При проведении имитационного моделирования внутренней структуры пылевых фрактальных кластеров рассмотрен диапазон фрактальных размерностей от 2.025, для разреженных агрегатов, до 2.975 для плотных пористых. В качестве





Рис. 5. Зависимость пористости пылевого фрактального кластера и от его фрактальной размерности.



Рис. 6. Пылевой фрактальный кластер размерностью 2.025: (а) – заполнение охватывающего объема, (б) – структура кластера, (в) – распределение тугоплавкой составляющей, (г) – распределение ледяной составляющей.

охватывающего объема рассмотрена сфера диаметром 5 см. Массовые доли компонент были приняты равными 0.4 для "ледяной" составляющей, и 0.6 для "тугоплавкой". По результатам имитационного моделирования внутренней структуры таких пылевых кластеров могут быть построены приближенные зависимости пористости от фрактальной размерности, при фиксированном охватывающем объеме (рис. 5).

На характер зависимости пористости от фрактальной размерности полидисперсных кластеров существенное влияние оказывают диапазоны распределений размеров и массовые доли компонент, а также отношения медианных размеров компонент к размерам охватывающего объема кластера. Однако для монодисперсных кластеров такая зависимость вполне однозначная.

Рассмотрим полученную структуру пылевых фрактальных кластеров для некоторых характер-

ных значений их заданной фрактальной размерности.

Кластер с фрактальной размерностью 2.025. Масса кластера ~0.8258 г, масса ледяной составляющей ~0.47 г, масса тугоплавкой составляющей ~0.356 г. Кластер состоит из 10980 частиц (ледяных: 698, тугоплавких: 10282), имеет плотность вещества, т.е. отношение массы кластера в граммах к охватывающему объему в кубических сантиметрах, 0.018 г/см³. На рис. 6 представлена структура данного кластера.

Кластер с фрактальной размерностью 2.25. Масса кластера ~1.612 г, масса ледяной составляющей ~0.682 г, масса тугоплавкой составляющей ~0.930 г. Кластер состоит из 27419 частиц (ледяных: 933, тугоплавких: 26486), имеет плотность вещества 0.034 г/см³. На рис. 7 представлена структура данного кластера.



Рис. 7. Пылевой фрактальный кластер размерностью 2.25: (а) — заполнение охватывающего объема, (б) — структура кластера, (в) — распределение тугоплавкой составляющей, (г) — распределение ледяной составляющей.



Рис. 8. Пылевой фрактальный кластер размерностью 2.5: (а) – заполнение охватывающего объема, (б) – структура кластера, (в) – распределение тугоплавкой составляющей, (г) – распределение ледяной составляющей.

Кластер с фрактальной размерностью 2.5. Масса кластера ~4.012 г, масса ледяной составляющей ~1.595 г, масса тугоплавкой составляющей ~2.417 г. Кластер состоит из 71598 частиц (ледяных: 2260, тугоплавких: 69338), имеет плотность вещества 0.097 г/см³. На рис. 8 представлена структура данного кластера.

Кластер с фрактальной размерностью 2.75. Масса кластера ~12.02 г, масса ледяной составляющей ~4.8 г, масса тугоплавкой составляющей ~7.22 г. Кластер состоит из 214974 частиц (ледяных: 6847, тугоплавких: 208127), имеет плотность вещества 0.28 г/см³. На рис. 9 представлена структура данного кластера.

Кластер с фрактальной размерностью 2.975. Масса кластера ~30.915 г, масса ледяной составляющей ~12.391 г, масса тугоплавкой составляющей ~18.523 г. Кластер состоит из 552600 частиц (ледяных: 17558, тугоплавких: 535042), имеет плотность вещества, 0.73 г/см³. На рис. 10 представлена структура данного кластера.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанная методика имитационного моделирования внутренней структуры пылевых кластеров с использованием фрактального подхода, метода проницаемых частиц и соответствующих алгоритмов численного моделирования позволили получить результаты, вносящие вклад в понимание характера образования и дальнейшей эволюции первичных твердых частиц – заро-



Рис. 9. Пылевой фрактальный кластер размерностью 2.75: (а) – заполнение охватывающего объема, (б) – структура кластера, (в) – распределение тугоплавкой составляющей, (г) – распределение ледяной составляющей.

АСТРОНОМИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК том 55 № 3 2021

Рис. 10. Пылевой фрактальный кластер размерностью 2.975: (а) – заполнение охватывающего объема, (б) – структура кластера, (в) – распределение тугоплавкой составляющей, (г) – распределение ледяной составляющей.

дышей прото-планетезималей. Проведенное моделирование показало, что предложенные методика и алгоритм дают возможность построить адекватную геометрическую модель внутренней структуры пылевых фрактальных кластеров, которая открывает возможности проводить исследования их столкновительной эволюции, в том числе изучать изменение внутренней структуры, порог разрушения от степени пористости и величины энергии. К сожалению, предложенный на данном этапе алгоритм формирования кластера не позволяет точно воспроизвести заданные массовые доли частиц разных сортов для кластеров с малой фрактальной размерностью. Например, в проведенном моделировании заданные массовые доли сохраняются, начиная с фрактальной размерности 2.25.

Основным достоинством разработанной методики является то, что в процессе формирования кластеров происходит сохранение свойств составляющих кластер частиц. Несмотря на то, что это приводит в существенному увеличению вычислительной сложности алгоритмов, однако, позволяет проводить моделирование процессов с учетов физических свойств и химического состава индивидуальных модельных частиц. В результате удается рассматривать процессы, связанные с изменением состояния или поведения частиц одного какого-либо сорта, и исследовать влияние таких процессов на поведение агломератов частиц других сортов в кластере. Например, учет различающихся прочности и теплофизических свойств частиц приводит к более качественному описанию столкновительной и тепловой эволюции как отдельных частиц, так и кластеров в целом.

Автор благодарен академику М.Я. Марову за научное руководство работами по планетной космогонии, в рамках которых проводились исследования по проблемам имитационного моделирования пылевых фрактальных кластеров, и обсуждение полученных результатов. Автор благодарен А.Б. Макалкину за плодотворные обсуждения вопросов эволюции твердотельной компоненты в протопланетных дисках и предложения, позволившие существенно улучшить данную статью. Автор благодарен рецензентам за ценные замечания и предложения, позволившие улучшить содержание статьи.

Автор признателен правительству Российской Федерации и Министерству высшего образования и науки РФ за поддержку этой работы по гранту 075-15-2020-780 (N13.1902.21.0039). Часть расчетов, относящаяся к изучению процессов в ранней Солнечной системе, выполнена в соответствии с планами фундаментальных исследований, определенных госзаданием Институту геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Колесниченко А.В., Маров М.Я. К моделированию процесса агрегации пылевых фрактальных кластеров в ламинарном протопланетном диске // Астрон. вестн. 2013. Т. 47. № 2. С. 92–111. (Kolesnichenko A.V., Marov M.Y. Modeling of aggregation of fractal dust clusters in a laminar protoplanetary disk // Sol. Syst. Res. 2019. V. 47. № 2. Р. 80–98.)
- Колесниченко А.В., Маров М.Я. Механизм потоковой неустойчивости в газопылевой среде протопланетного диска и формирование пылевых фрактальных кластеров // Астрономический вестник. Исследования Солнечной системы. 2019. Т. 53. № 3. С. 195–213. (*Kolesnichenko A.V., Marov M.Y.* Streaming instability in the gas-dust medium of the protoplanetary disc and the formation of fractal dust clusters // Sol. Syst. Res. 2019. V. 53. № 3. P. 181–198.)
- *Кроновер Р.М.* Фракталы и хаос в динамических системах. Основы теории. М.: Постмаркет, 2000. 352 с.
- Маров М.Я., Русол А.В. Модель ударного взаимодействия тел в газопылевом протопланетном диске // ДАН. 2011. Т. 441. № 4. С. 464–467.
- Маров М.Я., Русол А.В. Оценка параметров столкновений пылевых фрактальных кластеров в газопылевом протопланетном диске // Письма в Астрон. журн. 2018. Т. 44. № 7. С. 517–524. (Marov M.Y., Rusol A.V. Estimating the parameters of collisions between fractal dust clusters in a gas-dust protoplanetary disk // Astron. Lett. 2018. V. 44. № 7. Р. 474–481.)

- Маров М.Я., Колесниченко А.В., Макалкин А.Б., Дорофеева В.А., Зиглина И.Н., Чернов А.В. От протосолнечного облака к планетной системе: Модель эволюции газопылевого диска // Проблемы зарождения и эволюции биосферы. Том 1 / Ред. Галимов Э.М. М.: Книжный дом "ЛИБРОКОМ"/URSS, 2008. C. 223-274.
- Маров М.Я., Дорофеева В.А., Колесниченко А.В., Королев А.Е., Самылкин А.А., Макалкин А.Б., Зиглина И.Н. Моделирование формирования и ранней эволюции допланетных тел // Проблемы зарождения и эволюции биосферы. Т. 2 / Ред. Галимов Э.М. М.: URSS, 2013. C. 13–33.
- Маров М.Я., Русол А.В., Макалкин А.Б. Моделирование фрагментации пыле-ледяных кластеров на линии льда в протопланетных дисках // Астрон. вестн. 2021. T. 55. № 3. C. 244-264. (Marov M.Y., Rusol A.V., Makalkin A.B. Modeling the fragmentation of dust-ice clusters on the snowline in protoplanetary disks // Sol. Syst. Res. 2021. V. 55. №. 3. P. 244-264.)
- Морозов А.Д. Введение в теорию фракталов. М.: Институт компьютерных исследований, 2002. 160 с.
- Смирнов Б.М. Физика фрактальных кластеров. М.: Наука, 1991.
- Сафронов В.С. Эволюция допланетного облака и образование Земли и планет. М.: Наука, 1969. 244 с.
- Сафронов В.С. Эволюция пылевой компоненты околосолнечного допланетного диска // Астрон. вестн. 1987. T. 21. № 4. C. 216–220.
- Akimkin V.V., Ivlev A.V., Caselli P. Inhibited coagulation of micron-size dust due to the electrostatic barrier // Astrophys. J. 2020. V. 889. Article id. 64. 9 p.
- Brisset J., Miletich T., Metzger J., Rascon A., Dove A., Colwell J. Multi-particle collisions in microgravity: Coefficient of restitution and sticking threshold for systems of mmsized particles // Astron. and Astrophys. 2019. V. 631. Article id. A35. 15 p.
- Dominik C., Tielens A.G.G.M. Resistance to rolling in the adhesive contact of two elastic spheres // Philosphical Magazine A. 1995. V. 72. P. 783-803.
- Ivlev A.V., Akimkin V.V., Caselli P. Ionization and dust charging in protoplanetary disks // Astrophys. J. 2016. V. 833. Article id. 92. 15 p.
- Ishihara T., Kobayashi N., Enohata K., Umemura M., Shiraishi K. Dust coagulation regulated by turbulent clustering in protoplanetary disks // Astrophys. J. 2018. V. 854. Article id. 81. 16 p. https://doi.org/10.3847/1538-4357/aaa976
- Johansen A., Blum J., Tanaka H., Ormel C., Bizzarro M., Rickman H. The multifaceted planetesimal formation process // Protostars and Planets VI / Eds Beuther H., Klessen R.S., Dullemond C.P., Henning T. Tucson: Univ. Arizona Press, 2014. P. 547-570.
- Kataoka A., Tanaka H., Okuzumi S., Wada K. Fluffy dust forms icy planetesimals by static compression // Astron. and Astrophys. 2013. V. 557. Article id. L4. 4 p.
- Matthews L.S., Hvde T.W. Effects of the charge-dipole interaction on the coagulation of fractal aggregates // IEEE Trans. Plasma Sci. 2004. V. 32. P. 586-593.
- Marov M.Ya. The Formation and Evolution of the Solar System. Oxford Research Encyclopedia of Planetarv Science. 2018. https://doi.org/10.1093/acrefore/9780190647926.013.2

АСТРОНОМИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК том 55 Nº 3 2021

- Marov M.Ya., Rusol A.V. Gas-dust protoplanetary disc: Modeling primordial dusty clusters evolution // J. Pure Appl. Phys. 2015a. V. 3. P. 16-23.
- Marov M.Ya., Rusol A.V. Gas-dust protoplanetary disc: modeling collisional interaction of primordial bodies // J. Modern Physics. 2015b. V. 6. P. 181.
- Perry J.D., Gostomski E., Matthews L.S., Hyde T.W. The influence of monomer shape on agregate morphologies // Astron. and Astrophys. 2012. V. 539. Article id. A99.
- Ringl C., Bringa E.M., Bertoldi D.S., Urbassek H.M. Collisions of porous clusters: A granular-mechanics study of compaction and fragmentation // Astrophys. J. 2012. V. 752. P. 151–164.
- Tazaki R., Nomura H. Outward motion of porous dust aggregates by stellar radiation pressure in protoplanetary disks // Astrophys. J. 2015. V. 799. Article id. 119. 9 p. https://doi.org/10.1088/0004-637X/799/2/119
- Tazaki R., Tanaka H., Okuzumi S., Kataoka A., Nomura H. Light scattering by fractal dust aggregates // Astrophys. J. 2016. V. 823. Article id. 70. 16 p. https://doi.org/10.3847/0004-637X/823/2/70
- TielensA. G.G.M., Allamandola L.J. Evolution of interstellar dust // Phisical Processes in Interstellar Clouds / Eds Morfill G.E., Sholer M. Dordrecht: Reidel Publishing Company, 1987. P. 333-376.
- Tielens A.G.G.M., Waters L.B.F.M., Bernatowicz, T.J. Origin and Evolution of Dust in Circumstellar and Interstellar Environments // Chondrites and the Protoplanetary Disk. ASP Conf. Series. V. 341 / Eds Krot A.N., Scott E.R.D., Reipurth B. San Francisco: Astron. Soc. of the Pacific, 2005. P. 605-631.
- Tielens A.G.G.M. Chemical and physical properties of interstellar dust // The Spectral Energy Distribution of Galaxies Proceedings IAU Symp. No. 284 / Eds Tuffs R.J., Popescu C.C. Cambridge University Press, 2011. P. 72-81.
- Umstätter Ph., Urbassek H. Fragmentation and energy dissipation in collisions of polydisperse granular clusters // Astron. and Astrophys. 2020. V. 633. Article id. A24. 7 p. https://doi.org/10.1051/0004-6361/201936527
- Wada K., Tanaka H., Suyama T., Kimura H., Yamamoto T. Numerical simulation of dust aggregate collisions. I. Compression and disruption of two-dimensional aggregates // Astrophys. J. 2007. V. 661. P. 320-313.
- Wada K., Tanaka H., Suyama T., Kimura H., Yamamoto T. Numerical simulation of dust aggregate collisions. II. Compression and disruption of three-dimensional aggregates in head-on collisions // Astrophys. J. 2008. V. 677. P. 1296–1308.
- Wada K., Tanaka H., Suyama T., Kimura H., Yamamoto T. Collisional growth conditions for dust aggregates // Astrophys. J. 2009. V. 702. P. 1490-1501.
- Wada K., Tanaka H., Suyama T., Kimura H., Yamamoto T. Growth and disruption of dust aggregates by collisions // COSMIC DUST-NEAR AND FAR ASP Conference Series. / Eds Henning Th., Grun E., Steinacker J. 2009. V. 414. P. 347-355.
- Wright E.L. Long-wavelenghts absorption by fractal dust grains // Astrophys. J. 1987. V. 320. P. 818-824.
- Wright E.L. Fractal dust grains around R Coronae Borealis stars // Astrophys. J. 1989. V. 346. P. L89-L91.
- Youdin A.N., Goodman J. Streaming instabilities in protoplanetary disks // Astrophys. J. 2005. V. 620. P. 459-469.