

TARTU ÜLIKOOL
Füüsika-keemiateaduskond
KESKKONNAFÜÜSIKA INSTITUUT

SANDER MIRME

**ELEKTRILISE AEROSOLISPEKTROMEETRI LAADURI
KUJU JA AEROSOLI LAENGUJAOTUSE VAHELISE
SÕLTUVUSE MODELLEERIMINE**

Magistritöö keskkonnanfüüsika erialal

Juhendaja: vanemteadur, PhD AADU MIRME

Tartu 2005

Sisukord

1	Sissejuhatus	2
2	Osakese laadimine iooniväljas	3
2.1	Ioonide voo kirjeldamine	3
2.2	Osakese suuruse mõõtmise elektriline meetod	4
3	Elektri ja ioonivälja numbriline modelleerimine	8
3.1	Välja üldine kirjeldamine	8
3.2	Välja numbrilise modelleerimise põhimõtted	9
3.2.1	Elektrivälja arvutusmeetodid	9
3.2.2	Laengutiheduse arvutusmeetodid	11
4	Lõplike ruumalade ja laengukogumite kombineeritud meetod	13
4.1	Mudeli kirjeldus	13
4.2	Lahendi koondumine	14
4.3	Ääretingimused	14
5	Laaduri kvaliteedi hindamine	17
6	Arvutuste teostamine	19
6.1	Välja modelleerimise programm	19
6.1.1	Arvutusvõrgu genereerimine	19
6.1.2	Võrdlus analüütilise lahendiga	20
6.1.3	Mudeli vastavus reaalse aerosoolilaaduri koroonale	24
6.2	Osakeste laengujaotuse arvutamine	25
6.3	Laaduri varieerimine	28
7	Tulemused	30
8	Kokkuvõte	33

1 Sissejuhatus

Elektriline aerosooliosakeste suurusjaotuse mõõtmise meetod on tänapäeval kujunenud põhiliseks atmosfääriaerosooli uurimise vahendiks: EAS [1], SMPS, EEPS (TSI Inc.) jne. Meetodis analüüsitakse osakeste liikuvuste jaotust, mille põhjal hinnatakse nende suurusjaotust. Elektriline mõõtmismeetod koosneb kahest põhikomponendist: elektrilise liikuvuse analüüs, mis on hästi läbi töötatud (Tammet [2] jt.), ja osakeste laadimine.

Aerosooli laadimist reaalses laaduris pole käsitletud piisava põhjalikkusega. Samas on aerosooliosakeste suurusjaotuse mõõtmise täpsuse ja detailsuse jaoks laaduri omadused määrava tähtsusega.

Antud töö ülesandeks on reaalse laaduri aerosooli laadimise võimalikult detailne simuleerimine ning laaduri kuju ja aerosooli laengujaotuse vahelise sõltuvuse modelleerimine.

Töös leitakse elektri- ja ionivälja jaotus laaduris kasutades väljade numbrilist modelleerimist. Arvutatud väljade järgi hinnatakse aerosooliosakeste laadimist ja summarset laengujaotust laaduri väljundis. Jaotuste ja osakese läbimõõdu vahelise sõltuvuse põhjal arvutatakse laadurile kvaliteedihinnang.

Analüüsi aluseks on TSI Inc. ja Tartu Ülikooli keskkonnanfüüsika instituudi teadlaste koostöös välja töötatud mootori väljaheitegaaside osakeste suuruste mõõtja EEPS-3090.

2 Osakese laadimineiooniväljas

Aerosooliosake on õhus hõljuv kompaktnetahke või vedela aine kogum, mis oma põhiosas on suhteliselt stabiilne. Selle pinnal toimub ainevahetus (aurumine ja kondensatsioon) keskkonnaga. Osake võib kanda elektrilaengut. Sel juhul nimetatakse seda aerosoolseksiooniks.

Õhus on lisaks aerosoolseteleioonidele neist väiksemad nn. klasterioonid. Nende tuumaks on ioniseeritud molekulumida ümbritseb molekulaar ja elektrijõul koos püsiv molekulide kogum – klaster.

Õhumolekulid ioniseeruvad näiteks radioaktiivsel aine lagunemisel tekkitavate suure energiaga elementaarosakestega põrgetel, kosmilise kiirguse tõttu või põrgetel footonitega (fotoionisatsioon). Lihtsaim viis õhumolekulide ioniseerimiseks on korona lahendus.

Ioonid kaovad vastasmärgilisteioonidega kohtudes (rekombinatsioon), satudes aerosooliosakesele või muudele keskkonnas asuvatele pindadele.

2.1 Ioonide voo kirjeldamine

Peamisedioonide liikumise põhjused on termiline difusioon ja elektriväli.

Termiline difusioon on stohhastiline protsess ja kirjeldub difusioonivalemiga. Selle mõju iseloomustab iooni difusioonitegur. Iooni ja osakese liikumised seostatakse Brauni liikumise kaudu. Elektriväljas lisandub ioonijuhuslikule liikumisele suunatud komponent. Seda kirjeldatakse iooni elektrilise liikuvusega:

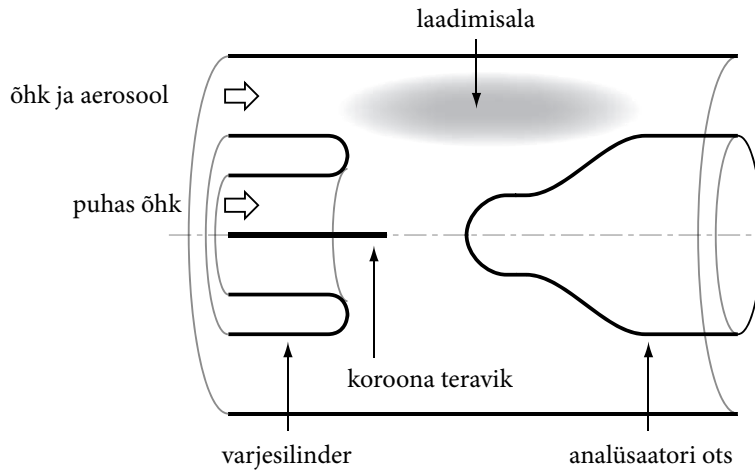
$$\vec{v}_E = k \cdot \vec{E}, \quad (2.1)$$

kus: \vec{v} – iooni kiirus,
 k – iooni elektriline liikuvus,
 \vec{E} – elektrivälja tugevus.

Summaarsetioonide voo tihedust kirjeldab Ficki 1. seadus (2.2):

$$\vec{j} = n \cdot k \cdot \vec{E} - D \cdot \nabla n \quad (2.2)$$

kus: n – ioonide kontsentratsioon ruumis,
 \vec{j} – ioonide voo tihedus,
 D – difusioonitegur.



Joonis 2.1: Tüüpiline spektromeetri laadur

2.2 Osakese suuruse mõõtmise elektriline meetod

Osakese suuruse mõõtmise elektriline meetod põhineb seosel osakese suuruse, elektrilaengu ja liikumiskiiruse vahel elektriväljas. Mõõtes osakese elektrilise liikuvuse ja teades osakese elektrilaengut, saab arvutada osakese suuruse eeldusel kasutades Millikani valemit:

$$k(r, q) = \frac{qe}{6\pi\eta r} \left[1 + \frac{l}{r} \left(A + B \exp\left(-C\frac{r}{l}\right) \right) \right], \quad (2.3)$$

kus: q – elementaarlaengute arv osakesel
 r – osakese raadius
 η – õhu viskoossus
 l – õhumolekulide keskmine vaba tee pikkus
 A, B, C – konstandid

Millikani valemile on välja pakutud mitmesuguseid parandusi, et see töötaks paremini üliväikeste osakeste piirkonnas, s.h. klasterioonidega.

Kuna liikuvuse mõõtjate (nn. liikuvusanalüsaatorite) teooria ja praktika on hästi läbi töötatud [2], siis langeb põhiraskus osakeste optimaalsele laadimisele ja laengujaotuse määratusele. Tavaliselt kasutatakse osakeste laadimistiooniväljas, kus ionide allikaks on koroonalahendus pingestatud teraviku tipus. Tüüpiline laadur on näidatud joonisel 2.1. On paratamatu ionide liikumine lisaks difusioonile ka elektrivälja toimel.

On välja töötatud mitmeid laadimise teooriaid. Neis eristatakse kahte laadimise tüüpi: difusioonlaadimisel satub laeng osakesele soojusliikumise

tõttu [3], elektriväljas laadimisel satuvad ioonid osakesele, sest elektrivälja jõujooned lõikuvad sellega [4].

Kui osake asubioonväljas, s.t. teda ümbritseb teatud kontsentratsiooniga ühemärgiliste ionide pilv (unipolaarne ionatmosfäär), arvutatakse tõe- näosuslik osakesele langevate ionide voo tugevus. Voog sõltub kontsentratsioonist ruumis, nende liikuvusest, välise elektrivälja tugevusest, osakesel juba olemasolevast laengust, osakese suurusest, dielektrilisest läbitavusest ja teistest osakese omadustest. Osakeste laadumist võib kirjeldada diferent- siaalvõrranditega:

$$\begin{cases} \frac{dN_0}{dt} = -\Phi_0 N_0 \\ \frac{dN_1}{dt} = \Phi_0 N_0 - \Phi_1 N_1 \\ \vdots \\ \frac{dN_q}{dt} = \Phi_{q-1} N_{q-1} - \Phi_q N_q \end{cases}, \quad (2.4)$$

kus: N_q – q elementaarlaenguga osakeste tihedus,

Φ_q – ionide voog q elementaarlaenguga osakestele.

Võrrandsüsteemist 2.4 saab leida osakeste laengujaotuse pärast tuntudiooniväljas viibimist, kui on teada ionide voog Φ_q . Voo saab arvutada Ficki valemiga (2.2) võttes arvesse, et potentsiaale osakest ümbitsevas ruumis on kirjeldatud valemiga 2.5:

$$\varphi(r, \theta) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r} + E_0 r \left(1 - \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \frac{r_0^3}{r^3} \right) \cos \theta \quad (2.5)$$

kus: r – kaugus osakese tsentrist

θ – polaarkoordinaat elektrivälja sihi suhtes

ϵ_0 – vaakumi dielektriline läbitavus

q – osakese laeng

r_0 – osakese raadius

ϵ – osakese suhteline dielektriline läbitavus

E_0 – välise elektrivälja tugevus

Võrrandite lahendamine on keeruline ja aeganõudev protseduur. Keskkon- nafüüsika instituudis on voo Φ_q jaoks välja töötatud lähendusvalemid (Madis Noppel [5] ja Aadu Mirme (käsikiri)).

Voogu juhtivate parameetritena kasutatakse õhu üldistatud elektrijuhti- vust [6]. Madis Noppeli poolt on lisaks sisse toodud üldistatud elektrivälja

tugevuse parameeter ning osakese laetuse ja dielektrilise läbitavuse parameetrid [7].

Osakese lõplik laengujaotus leitakse integreerides laenguvoogusid üle ioonivälja läbiva osakese liikumistrajektoori. Selleks kasutatakse kahte meetodit. Salmi valem [8] pakub täpse lahendi võrrandsüsteemile 2.4 suvalise esialgse laengujaotuse puhul, kuid eeldab, et Φ_q on konstantne. Reaalsuses elektriväljatugevuse ja ioonitiheduse muutumise tõttu Φ_q trajektoori ulatuses muutub. Selle arvessevõtmiseks võib valemit rakendada järjestikku lühikestel trajektoori lõikudel, kus Φ_q vaadeldakse lõigu ulatuses konstantsena ja uue lõigu algjaotuseks võetakse eelmise lõigu lõppjaotus.

Salmi valem ei sobi suurte laengutega osakeste jaoks arvutustäpsuse piiratud tõttu. Sel juhul kasutatakse teist meetodit: laengujaotus lähendatakse jaotuse esimese nelja momendiga [9]:

$$\begin{aligned} z &= \frac{q-\bar{q}}{\sigma} \\ P_q &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \left[1 + \frac{\nu_1}{6}(z^3 - 3z) + \frac{\nu_2}{24}(z^4 - 6z^2 + 3) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\nu_1^2}{72}(z^6 - 15z^4 + 45z^2 - 15)\right] \end{aligned} \quad (2.6)$$

kus P_q on osakese tõenäosus omada laengut q . Momentide väärtused leitakse integreerides neile kehtivat diferentsiaalvõrrandite süsteemi:

$$\begin{cases} \frac{d\bar{q}}{dt} = \sum_q \Phi_q P_q \\ \frac{d(q-\bar{q})^2}{dt} = 2\sum_q (q-\bar{q}) \Phi_q P_q + \frac{d\bar{q}}{dt} \\ \vdots \end{cases} \quad (2.7)$$

kus jaotuse standardhälve avaldub:

$$\sigma = \sqrt{(q-\bar{q})^2} \quad (2.8)$$

Käesolevas töös piirduetakse esimese kahe momendi arvutamisega (keskmine väärtus \bar{q} ja standardhälve σ), sest järgmiste väärtused on väikesed [10].

Mida väiksem osake, seda suurem tõenäosus jääda hoopis laenguta. Osakeste elektriline liikuvus ei sõltu mitte kõigi osakeste keskmisest laengust, vaid laetud osakeste keskmisest laengust. Kui osakeste täpne laengujaotus ei ole teada (ei kasutata Salmi valemit), kasutatakse osakeste elektrilise liikuvuse analüüsi juures laetud osakeste keskmise laengu hindamiseks parandusvalemit [6]:

$$q = \sqrt{1 + \bar{q}^2} \quad (2.9)$$

Eriti lihtsustatud juhu jaoks on välja töötatud valemid, mis arvestavad ainult summaarset ioniväljas viibimise aega ja keskmisi väljaväärtuseid osakese trajektooriga.

Mirzabekjani [11] valemi puhul eeldatakse, et osakene on sfääriline, juhtiv ja selle laeng on puhta difusioon- ja puhta väljaslaadimise laengute aritmeetiline summa.

Veelgi lihtsam on Hannes Tammeti mugandus [6]. Sellest saab hinnata keskmise laengu sõltuvalt osakese suurusest. Laengujaotuse laiuseks võib võtta tasakaalulise jaotuse laiuse [10].

3 Elektri jaioonivälja numbriline modelleerimine

3.1 Välja üldine kirjeldamine

Elektrivälja laaduris on kirjeldatav Maxwelli võrranditega:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \vec{B} = 0 \\ \nabla \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \vec{D} = \rho \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \vec{B} = \mu\mu_0\vec{H} \\ \vec{D} = \varepsilon\varepsilon_0\vec{E} \end{array}, \quad (3.1)$$

kus: \vec{E} – elektrivälja tugevus,
 \vec{B} – magnetiline induktsioon,
 \vec{H} – magnetvälja tugevus,
 \vec{D} – elektrinihe,
 ε_0 – vaakumi dielektriline läbitavus,
 ε – suhteline dielektriline läbitavus,
 \vec{j} – voolutihedus,
 ρ – laengutihedus,
 μ_0 – magnetiline konstant,
 μ – suhteline magnetiline läbitavus.

Kui k on ionide liikuvus, siis ionide liikumiskiirus on:

$$\vec{v} = k \cdot \vec{E}. \quad (3.2)$$

Alati peab kehtima voolu pidevuse tingimus:

$$\nabla \cdot \vec{j} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (3.3)$$

Koroonaprotsessi dünaamika modelleerimist pole laaduri hindamisel tarvis. Otsitakse statsionaarset lahendit – kõik muutujad peavad olema ajast sõltumatud. Magnetvälja mõju ionide liikumisele ei arvestata.

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \times \vec{E} = 0 \\ \nabla \cdot \vec{D} = \rho \\ \nabla \cdot \vec{j} = 0 \end{array} \right. \quad (3.4)$$

Kui kasutada elektrivälja skalaarpotentsiaali:

$$\vec{E} = -\nabla\varphi, \quad (3.5)$$

on võrrandsüsteemiga 3.4 võrdväärne:

$$\begin{cases} -\nabla^2\varphi = \frac{\rho}{\varepsilon\varepsilon_0} \\ \nabla(\nabla\varphi \cdot \rho \cdot k) = 0 \end{cases}. \quad (3.6)$$

Kui ruum on silindersümmeetrilise konfiguratsiooniga, võib üle minna silindrilisele koordinaadistikule ja ülesanne lihtsustub kolmemõõtmelisest kahemõõtmeliseks. Et tavaliselt ongi laadurid silindersümmeetrilised, peetakse käesolevas töös üldjuhul silmas kahemõõtmelist juhtu.

3.2 Välja numbrilise modelleerimise põhimõtted

Numbrilise modelleerimise puhul pideva välja ülesanne diskretiseeritakse. Muutujaid vaadeldakse lõplikus hulgas ruumi punktides, tavaliselt mingi võrgustiku sõlmedes. See võimaldab pideva diferentsiaal- või integraalvõrrandite lahendamise ülesande asendada algebralise võrrandsüsteemi lahendamise ülesandega, s.t. maatriksülesandega. Sellise ülesande lahendamise edukus sõltub paljude tegurite koosmõjust: võrrandite iseloomust, diskretiseerimisest ja diskreetse välja kirjeldamisest ning lõpuks konkreetsest lahendamise meetodist.

3.2.1 Elektrivälja arvutusmeetodid

Elektrivälja numbrilisel modelleerimisel lähtutakse enamasti Poissoni võrrandist diferentsiaal- (3.7) või integraalkujul (3.8):

$$-\nabla^2\varphi = \frac{\rho}{\varepsilon\varepsilon_0}, \quad (3.7)$$

$$\int_{\Gamma} \nabla\varphi \cdot \vec{dS} = - \int_{\Omega} \frac{\rho}{\varepsilon\varepsilon_0} \cdot dV. \quad (3.8)$$

Ääritingumused antakse Dirichlet' tingimusena – määratakse potentsiaali väärtus äärepinnal:

$$\varphi|_{\Gamma_i} = g_i \quad (3.9)$$

või Neumani tingimusena – määratakse potentsiaali normaalisuunaline tuletis:

$$\left. \frac{\partial\varphi}{\partial n} \right|_{\Gamma_j} = g_j. \quad (3.10)$$

Osatuletistega diferentsiaalvõrrandite numbrilisel lahendamisel on levinud lõplike vahede meetod (*finite difference method*, FDM). Selle meetodi puhul vaadeldakse muutujaid mingi võrgustiku sõlmedes. Välja kirjeldavad diferentsiaalvõrrandid lähendatakse diferentsvõrranditega [12].

Kuigi võrgustik, millel seda meetodit rakendada, võib põhimõtteliselt olla suvaline, kasutatakse üldjuhul regulaarset võrgustikku, kus võrgu jooned ühtivad mingi koordinaadistiku koordinaatjoontega.

Ruumi piirpinna kõverus ja koordinaatjoontega mitteühtimine muudab selle meetodi rakendamise keeruliseks.

Komplitseeritumate ruumikonfiguratsioonide jaoks sobib paremini lõplike elementide meetod (*finite element method*, FEM) [12]. Selle puhul diskretiseeritakse ruum väikesteks elementideks, mille kuju ja suurus võivad olla suvalised.

Lõplike elementide meetodi puhul lähtutakse probleemi integraalsest esitusest, s.t. vaadeldakse pind- või ruumintegraale. Väljamuutujad lähendatakse pidevate, tükati siledade funktsioonidega. Algebraised seosed saadakse minimiseerides lähendi mittevastavust kehtivatele integraalvõrranditele.

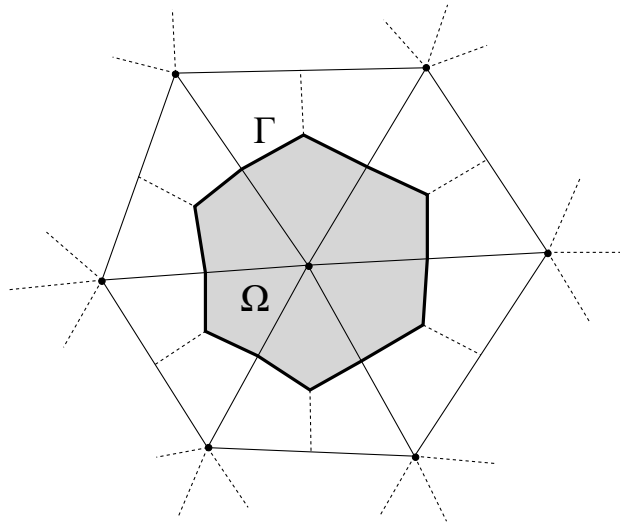
Meetodit on võimalik rakendada ka täiesti ebaregulaarse võrgu puhul. Lihtsaimal juhul kasutatakse kolmnurkvõrku, kus uuritavad suurused on määratud kolmnurkade sõlmedes ning kolmnurkade sees muutuvad need lineaarselt.

Lõplike elementide meetodile sarnane on lõplike ruumalade meetod (*finite volume method*, FVM). Selle puhul rakendatakse lahendatavaid integraalvõrrandeid otseselt ruumiosadele. Kolmnurkvõrgu puhul uuritakse võrrandite kehtivust sõlmi ümbritsevates ruumiosades (joonis 3.1), mis omavahel ei kattu ja täidavad kogu ruumi.

Poissoni võrrandi puhul nõutakse, et igas ruumiosas oleks rahuldatud integraalvõrrand 3.8. Sellest leitakse iga võrgu sõlme ja tema naabersõlmede potentsiaalide ning antud sõlmele vastava ruumiosa summaarse laengu vaheline seos:

$$\varphi_0 W'_0 - \sum_{i=1}^n \varphi_i W_{i,0} = \frac{Q_0}{\varepsilon \varepsilon_0}, \quad (3.11)$$

kus: φ_0 – antud võrgusõlme potentsiaal,
 $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ – naabersõlmede potentsiaalid,
 W', W – võrgu kujust sõltuvad kordajad,
 Q_0 – võrgusõlmele vastava ruumiosa summaarne laeng.



Joonis 3.1: Lõplike elementide või lõplike ruumalade meetodi kolmnurkvõrk ja ühte selle sõlme ümbritsev ruumiosa

Kõikidele sõlmedele kehtivaid seoseid sisaldava võrrandsüsteemi võib lahendada kui maatriksülesande või kasutades relaksatsiooni – lahendit otsitakse iteratiivselt, igal sammul leitakse sõlmedele valemist 3.11 uued potentsiaali väärtused arvestades eelmisel sammul leitud naabersõlmede potentsiaale.

Elektrivälja ülesande lahendamine õnnestub hästi, kui laengutihedus ruumis on ette teada. Laengutiheduste modelleerimine on keerulisem ja tihti kasutatakse spetsiifilisemaid meetodeid.

3.2.2 Laengutiheduse arvutusmeetodid

Laengu ruumtiheduse modelleerimisel peab arvestama, et elektrivälja ja laengutihedus on vastastikuselt sõltuvad ja lahendada tuleb terve võrrandsüsteem selle diferentsiaalvõrrandist (3.12) või integraalvõrrandist (3.13) lähtuvalt:

$$\begin{cases} -\nabla^2 \varphi = \frac{\rho}{\epsilon \epsilon_0} \\ \nabla(\nabla \varphi \cdot \rho \cdot k) = 0 \end{cases}, \quad (3.12)$$

$$\begin{cases} -\int_{\Gamma} \nabla \varphi \times \vec{ds} = \int_{\Omega} \frac{\rho}{\epsilon \epsilon_0} dV \\ \int_{\Gamma} \nabla \varphi \cdot \rho \cdot k \cdot dV = 0 \end{cases}. \quad (3.13)$$

Rangelt võttes iooni eluea jooksul tema liikuvus k muutub ning pealegi omab tõenäosuslikku jaotust. Kuna muutus pole suur [13], siis antud ülesande jaoks võib selle lugeda konstantseks ja võrdseks keskmise liikuvusega.

Laengutiheduste modelleerimiseks on kasutatud mitmeid meetodeid, mis üldjuhul on kombineeritud mingi eelpoolnimetatud elektrivälja modelleerimismeetodiga. Näiteks kasutatakse lõplike ruumalade ja vahede meetodi kombinatsiooni [14].

Levinud on trajektooride meetod [15]. See meetod lähtubiooniväljas keh-tivast reeglist, et laengutihedus sõltub ainult antud punkti jõudnud ionide vanusest ja laengutihedusest allikal [6]:

$$\rho = \frac{\rho_0}{1 + \frac{k\rho_0}{\varepsilon\varepsilon_0}t}, \quad (3.14)$$

kus: ρ_0 – ionide tihedus allikal

t – vaadeldavasse punkti jõudnud ionide vanus

Laengutiheduse leidmiseks ruumi suvalises punktis tuleb leida aeg t , mis kulub ionidel sellesse punkti jõudmiseks ja selleks on omakorda tarvis leida ionide trajektoor elektriväljas.

Arvutamiseks leitakse kõigepealt mingi meetodiga elektrivälja ilma laengutiheduseta. Seejärel arvutatakse vaheldumisi uued ionide trajektoorid ja uus, leitud laengutihedust arvestav elektrivälja seni kuni lahend koondub.

Selle meetodi puhul on oluline optimaalne trajektooride valimine. Et laengutihedused on otseselt arvutatavad ainult trajektooridel, peaks neid leiduma kõikjal piisavalt tihedalt, et nendevahelistes ruumis oleks võimalik tihedusväli hästi interpoleerida.

4 Lõplike ruumalade ja laengukogumite kombineeritud meetod

Laaduri iooni- ja elektrivälja leidmiseks arendati edasi kombineeritud meetodit, mis kasutab elektrivälja arvutamiseks lõplike ruumalade meetodit ja laengutiheduste arvutamiseks nn. laengukogumite meetodit [16]. Selle meetodi puhul pole pööratud tähelepanu täpsete teravikulähedaste koroonaprotsesside modelleerimisele, sest seda pole laaduri modelleerimisel tarvis.

4.1 Mudeli kirjeldus

Meetodit rakendatakse ebaregulaarsel kolmnurkvõrgul, sest see osutus laaduri modelleerimiseks kõige sobivamaks: näiteks saab korona teraviku läheduses, kus elektri- jaioonivälja gradiendid on suured, kasutada tihedamat võrku kui mujal ruumis.

Elektrivälja arvutamisel leitakse potentsiaali väärtused võrgu sõlmedes. S.t. kogu ruumis on potentsiaal pidev ja tükati lineaarne. Elektriväljatugevus on kolmnurkade piires konstantne ja kolmnurkade piiridel muutub hüppeliselt.

Laengukogumite meetod vaatleb väikeseid ruumiosi (joonis 3.1 lk. 11) kui ühtseid kogumeid, kus laengute lisandumine või eemaldumine muudab nende keskmisi laengutihedusi tervikuna. Laengutihedus võrgusõlme ümbritseva ruumiosa (s.o. kogumi) piires loetakse konstantseks ja kogumite vahelistel pindadel muutub see hüppeliselt.

Lahendit otsitakse iteratiivselt, arvutades kogumitevaheliste laenguvoogude põhjustatud laengutiheduste muutumist lõplike ajavahemike jooksul. Igas sõlmes kehtib seos:

$$\Delta Q = \Delta t \cdot (I_+ - I_-) , \quad (4.1)$$

kus: Q – kogu laenguhulk antud sõlme kogumis,
 I_+ – kogumisse sisenev laenguvoog,
 I_- – kogumist väljuv laenguvoog.

Kogumite piirpindu läbivate laenguvoogude arvutamisel kasutatakse valemit:

$$I_j = \int_{\Gamma_j} \rho \cdot k \cdot \vec{E} \cdot \vec{dS} . \quad (4.2)$$

Et kogumite piiril pole antud meetodi korral laengutihedus pidev, siis arvestatakse cool valemis (4.2) selle kogumi laengutihedust, millest vool lähtub.

Arvutusprotseduuri esimesel iteratsioonil leitakse elektriväli ilma laengutiheduseta. Järgmistel iteratsioonidel leitakse vaheldumisi uued laengutiheduste (4.1, 4.3) ja elektrivälja väärtused:

$$Q_{t+\Delta t} = Q_t + \Delta Q . \quad (4.3)$$

Iteratsioone korratakse kuni igas sõlmes $\Delta Q \rightarrow 0$, s.t. lahend on koondunud.

4.2 Lahendi koondumine

Lahendi koondumiseks on otsustava tähtsusega Δt valik. Selle sobivaim väärtus sõltub antud laengukogumi ruumalast ja selle ümbruses valitsevast elektriväljatugevusest. Mõlemad võivad terve ruumi ulatuses mitmete suurusjärkude ulatuses muutuda.

Seetõttu leitakse igal iteratsioonil igas sõlmes eraldi Δt . Seda tohib teha, sest otsitakse statsionaarset lahendit – oodatakse voolude tasakaalu tekkimist.

Laenguvoogusid vaadeldakse kui laengutihedust omava keskkonna liikumist. Keskkonna voog avaldub:

$$\Psi_j = \int_{\Gamma_j} k \cdot \vec{E} \cdot \vec{dS} . \quad (4.4)$$

Kogu ruumala, mida kogum naaberkogumitega Δt jooksul vahetab on hinnanguliselt kogumitevaheliste keskkonnavoogude absoluutväärtuste summa:

$$\Delta V = \Delta t \cdot \sum_j |\Psi_j| . \quad (4.5)$$

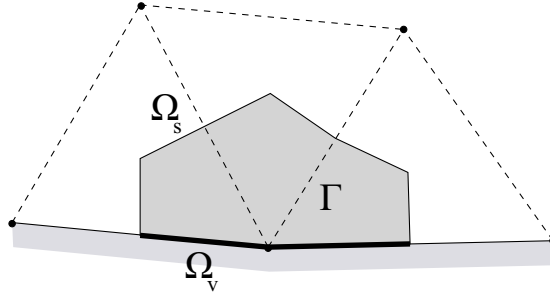
Igal iteratsioonil ei tohiks kogum vahetada välja endast suuremat ruumala.

$$\Delta V = \lambda \cdot V , \quad (\lambda < 1) . \quad (4.6)$$

Selleks leitakse Δt valemite 4.5 ja 4.6, kus λ on vabalt valitud parameeter.

4.3 Ääritingimused

Järgnevalt on ruumi äärel asuva kogumi (s.o. sõlmele vastava ruumiosa) pind jagatud naaberkogumitega piirnevaks (n.ö. sisemiseks – Γ_s) ja ruumi välispinnaga ühtivaks (välimiseks – Γ_v) osaks (joonis 4.1).



Joonis 4.1: Ruumi äärel asuv sõlm ja seda ümbritsev kogum

Laaduri ruumi lahtistel otstel (st. kujuteldavatel pindadel, läbi mille voolab õhk laadurisse või seal välja) kasutatakse Neumani ääritingimust. S.t. määratakse elektriväljatugevuse pinnaga risti olev komponent, mille lahtise otsa puhul võib võtta nulliks:

$$\Phi = \int_{\Gamma_s} E_{\perp} \cdot dS = E_{\perp} \cdot S_{\Gamma_s} = 0 . \quad (4.7)$$

Laaduri juhtivad, fikseeritud potentsiaaliga elektroodid on kirjeldatud Dirichle' ääritingimusega: potentsiaal sellel äärel asuvates sõlmedes on fikseeritud.

Juhul, kui elektriväli on suunatud ruumist välja, arvestatakse ka laengute äravoolu neile pindadele.

Koroneerivad pinnad käituvad elektrivälja jaoks täpselt samuti nagu fikseeritud potentsiaaliga pinnad. Erinevus seisneb määratud maksimaalses elektriväljatugevuses äärel – koroon tekke-elektriväljatugevuses. Kui väljatugevus seda piiri ületab, hakkab pind koroneerima ja tekkiv ruumlaeng vähendab väljatugevust tagasi koroon tekke-väljatugevuseni. Elektriväljatugevuse piiramiseks valitakse laengutihedus arvestades elektrivälja voogusid läbi ruumi-osa pinna (joonis 4.1):

$$\Phi_s = \int_{\Gamma_s} \vec{E} \cdot \vec{dS} , \quad \Phi_v = \int_{\Gamma_v} \vec{E} \cdot \vec{dS} . \quad (4.8)$$

Laenguvaba ruumi puhul peab summaarne elektrivälja voog olema null:

$$\Phi_s + \Phi_v = 0 . \quad (4.9)$$

Voog naabersõlmedest (Φ_s) selgub elektrivälja arvutuse käigus. Välispinda läbiva voo (Φ_v) kohta on teada ainult, et maksimaalne võimalik elekt-

rivälja tugevus pinnal on piiratud korona tekke-elektriväljatugevusega:

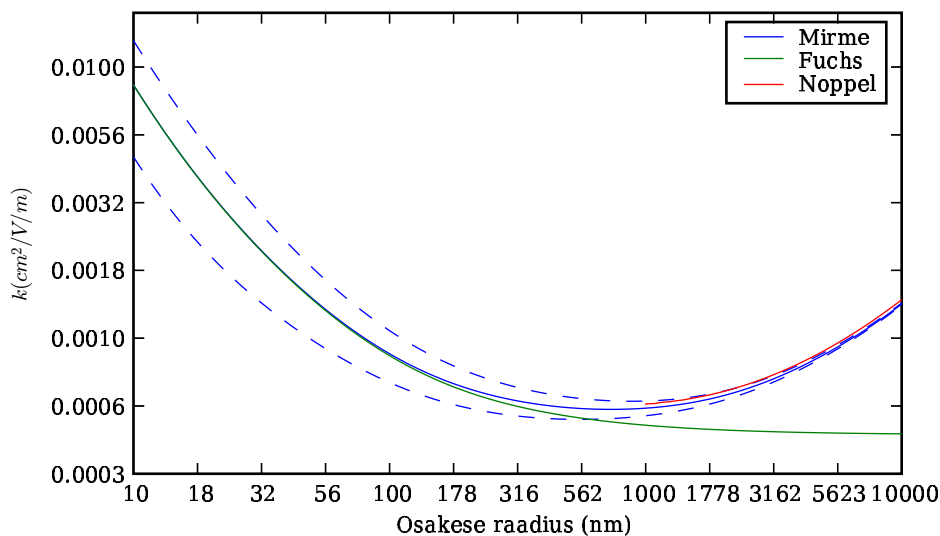
$$\Phi_v \leq \Phi_{lim} = \int_{\Gamma_v} E_0 \cdot dS . \quad (4.10)$$

Kui $\Phi_s > -\Phi_{lim}$, siis pole voogude tasakaal (4.9) võimalik ja pind korooneerib. Sel juhul leitakse antud kogumi laengutihedus arvestades valemeid:

$$\Phi_\rho = \frac{Q}{\varepsilon\varepsilon_0} , \quad (4.11)$$

$$\Phi_s + \Phi_v + \Phi_\rho = 0 \quad (\Phi_v = \Phi_{lim}) . \quad (4.12)$$

Mudel lubab määrata kõiki peamisi reaalse laaduri kirjeldamiseks vajalikke ääritingimusi. Erinevalt trajektoorie meetodist, ei tekita kirjeldatud meetodi jaoks probleeme ka mitut koronaioonide allikat sisaldava laaduri modelleerimine.



Joonis 5.1: Osakese keskmise liikuvuse sõltuvus raadiusest erinevate laadimise valemite puhul. Mirme voo puhul näidatud ka jaotuse laius ($\pm 2\sigma$)

5 Laaduri kvaliteedi hindamine

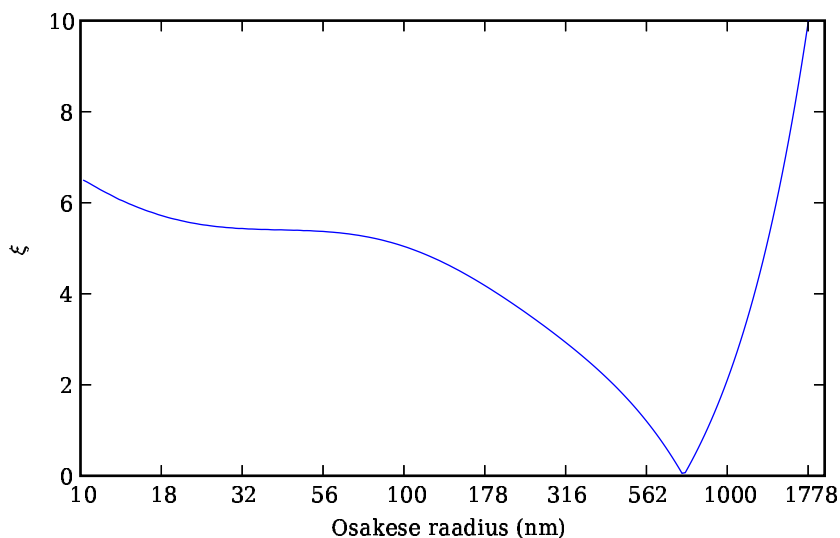
Elektrilises aerosoolispektromeetrias on oluline erineva suurustega osakeste eristamine nende elektrilise liikuvuse järgi. Sõltuvused osakese raadiuse ja elektrilise liikuvuse vahel on väga keerulised. Joonisel 5.1 on näidatud osakese keskmise elektrilise liikuvuse sõltuvus raadiusest. On näha, et väikeste osakeste ($r < 200\text{nm}$) juures on sõltuvus järsk. Seega on nende eristamine kerge. 1000nm osakeste juures liikuvus raadiusest peaaegu ei sõltu ja nende on eristamine peaaegu võimatu.

Eduard Tamm [17] on pakkunud analüütilise laadumise kvaliteedi kriteeriumiks ξ :

$$\xi = \frac{r}{\sigma_r|_k}, \quad (5.1)$$

kus $\sigma_r|_k$ on antud liikuvusele k vastava osakeste raadiustejaotuse standardhälve. Peatükis 2.2 kirjeldatud meetodid võimaldasid leida antud raadiusele vastava osakeste liikuvuse jaotuse standardhälbe $\sigma_k|r$. Selle kasutamiseks on lihtsalt tuletatav sobivam kvaliteedi kriteeriumi avaldis:

$$\xi \approx \frac{r}{\sigma_k|r} \left| \frac{d\bar{k}}{d\bar{r}} \right|. \quad (5.2)$$



Joonis 5.2: Laadimiskvaliteedi sõltuvus osakese raadiusest

Tüüpiline selle avaldise põhjal arvutatud laadimiskvaliteedi sõltuvus osakese raadiusest on toodud joonisel 5.2.

Eeldatakse, et laadimisparameeter ja väljatugevus on konstantsed. Selline olukord ei ole praktikas realiseeritav. Hannes Tammet on seda hinnanud lihtsa tranvselsaallaaduri korral [6]. Veidi täpsemini on laaduri eraldusvõimet hinnanud Aadu Mirme [1].

Reaalse laadimise korral ei põhjusta laengujaotuse hajumist mitte ainult laadimistprotsessi stohhastilisus, vaid ka laadumise sõltuvus osakese trajektoorist laaduri läbimisel. Erinevatel trajektooridel on laadimisparameetrid ja väljatugevused erinevad. Korrektseks hindamiseks tuleb arvestada mõlemat hajumist.

6 Arvutuste teostamine

Optimaalse laaduri leidmiseks valitakse kõigepealt laaduri baaskonfiguratsioon ja milliseid selle kuju või ääritingimusi kirjeldavaid parameetreid varieerida. Seejärel leitakse elektri- ja ioonivälja jaotused väljavaliitud parameetrite paljude erinevate väärtuste juures. Väljade järeltöötlusena arvutatakse igale variandile laadumiskvaliteedi hinnangud ning nende põhjal valitakse välja optimaalsed parameetrite väärtused.

See protsess on mahukas ja mitmetahuline. Käesoleva töö raames loodi tarkvarakomplekt selle protseduuri automatiseerimiseks. Inimese ülesandeks jääb kirjeldada lähtelaadur, määrata varieeritavad parameetrid koos nende väärtusvahemikega ning lõpuks leitud laadumiskvaliteedihinnangute põhjal valida välja sobivaimad parameetrite väärtused.

Järgnevalt kirjeldatakse arvutuste teostust.

6.1 Välja modelleerimise programm

Välja modelleerimiseks kasutati töös [16] kirjeldatud programmi oluliselt edasiarendatud versiooni, mis realiseerib eelpoolkirjeldatud lõplike ruumalade ja laengukogumite kombineeritud iteratiivse arvutusmeetodi.

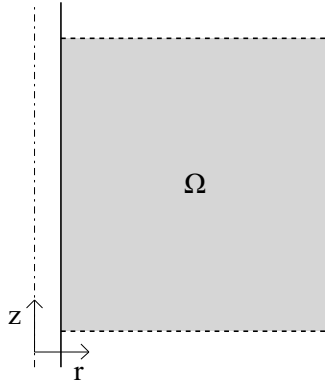
Programm on kirjutatud C++ keeles. Kõik arvutusparameetrid, konstandid ja ääritingimused antakse ette lihtsas tekstifailis. Ruumi konfiguratsiooni kirjeldamine sõltub kasutatavast arvutusvõrgu genereerimis-tarkvarast.

Tulemused väljastab programm erinevatel kujudel mitmetesse failidesse: lisaks võrgusõlmedes leitud välja väärtusele leitakse ka laengu ja elektrivälja voogude tugevused erinevatele ruumi äärepindadele ning interpoleeritud välja väärtused etteantava riskülikvõrgu sõlmedes, mis on tarvilik hilisemaks mugavaks laadumisparameetrite hindamiseks.

6.1.1 Arvutusvõrgu genereerimine

Arvutusvõrgu genereerimiseks leidub palju tarkvarapakette. Sobiva paketi valik on oluline, sest selle omadused määravad kogu modelleerimissüsteemi jaoks laaduri ruumi kirjeldamise lihtsuse ja paindlikkuse.

Antud ülesande puhul oli oluline ruumi kuju kirjeldamise lihtsus, et erinevate ruumikonfiguratsioonide genereermist oleks võimalik automatiseerida. Et elektrivälja ja laengutiheduse gradiendid on laaduri eri osades oluliselt



Joonis 6.1: Kontsentriliste silindrite ruumi konfiguratsioon

erinevad, on optimaalse arvutuskiiruse saavutamiseks tarvis kasutada eba-homogeenset võrku – kolmnurkade keskmine tihedus peaks sõltuma kohast ruumis.

Katsetuste käigus valiti välja programm BAMG (Bidimensional Anisotropic Mesh Generator, autor Frédéric Hecht). See võimaldab genereerida eba-homogeenset anisotroopset¹ kolmnurkvõrku. Ka keeruliste ruumikonfiguratsioonide kirjeldamine on selle programmi puhul lihtne – näiteks on võimalik ruumile anda kõverjoonelisi piire. Vajadusel saab ette määrata mõnede võrgusõlmede asukohad ja omavahelised seosed.

6.1.2 Võrdlus analüütilise lahendiga

Mudeli õigsust kontrolliti tuntud kahe kontsentrilise silindri vahelise ruumi väljade arvutamisega (joonis 6.1). Sisemine silinder on kõrgema potentsiaaliga kui välimine ja elektriväli selle pinnal on piisav koroonatekkeks.

Sellise ülesande analüütiline lahend on:

$$E(r) = \frac{1}{r} \sqrt{E_g^2 (r^2 - r_0^2) + E_0^2 r_0^2}, \quad (6.1)$$

kus: r – kaugus teljest,

r_0 – sisemise silindri raadius,

E_0 – elektrivälja tugevus sisemise silindri pinnal,

E_g – parameeter, mis sõltub koroonavoolust ja ionide liikuvusest .

E_0 näitab koroonatekke-elektriväljatugevust.

¹Kolmnurkade keskmine tihedus võib sõltuda suunast

Töös on E_g leidmiseks kasutatud numbrilist integreerimist nii, et kehtiks tingimus:

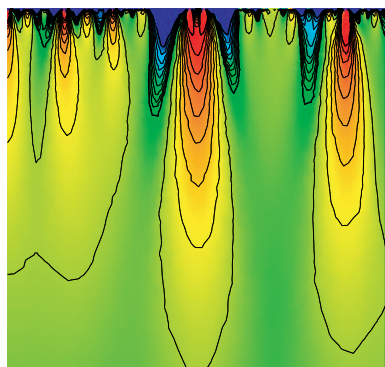
$$\int_{r_1}^{r_0} E(r) dr = \Delta\varphi . \quad (6.2)$$

Modelleerimisel selgus, et mida lähemal on süsteem koroonale, seda ebastabiilsem on lahend – seda raskemini koondub mudeli arvutustulemus. See vastab reaalsele koroonale, mis võib kustumispiirile lähenedes olla ebastabiilne. Seetõttu on siin mudelit testitud kahel juhul: esimesel, raskemal juhul on süsteem koroonale lähedal ja teisel, kergemal juhul on süsteem piirist suhteliselt kaugel.

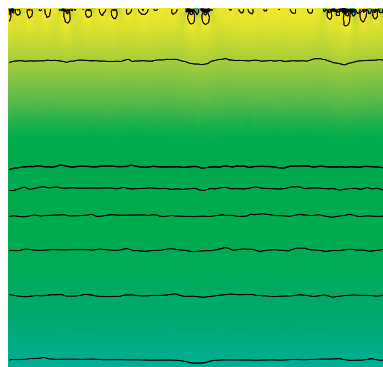
Mudelit testiti 10mm pikkusel jupil silindritest raadiustega $r_0 = 0.5\text{mm}$ ja $r_1 = 10\text{mm}$. Keskmise silindri potentsiaal välimise suhtes oli $\Delta\varphi = 1\text{kV}$.

Antud konfiguratsioonis oleks laenguvaba ruumi puhul elektrivälja sise-mise silindri pinnal $E(r_0) \approx 0.668 \frac{\text{kV}}{\text{mm}}$. Raskemaks katseks on koroonale tekke-elektrivälja valitud² $E_0 = 0.6 \frac{\text{kV}}{\text{mm}}$. Tulemused on joonistel 6.3 ja 6.4.

Kergemaks katseks on koroonale tekke-elektrivälja valitud $E_0 = 0.3 \frac{\text{kV}}{\text{mm}}$. Tulemused on joonistel 6.5 ja 6.6.



(a) raske juht

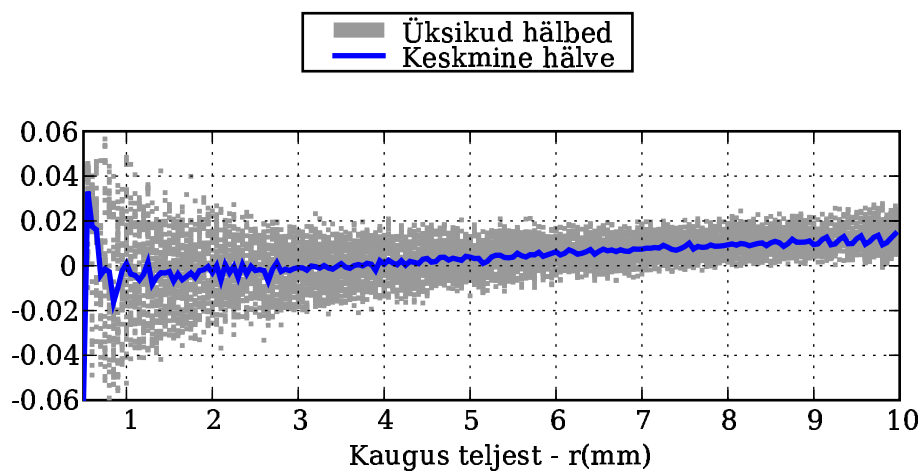


(b) kerge juht

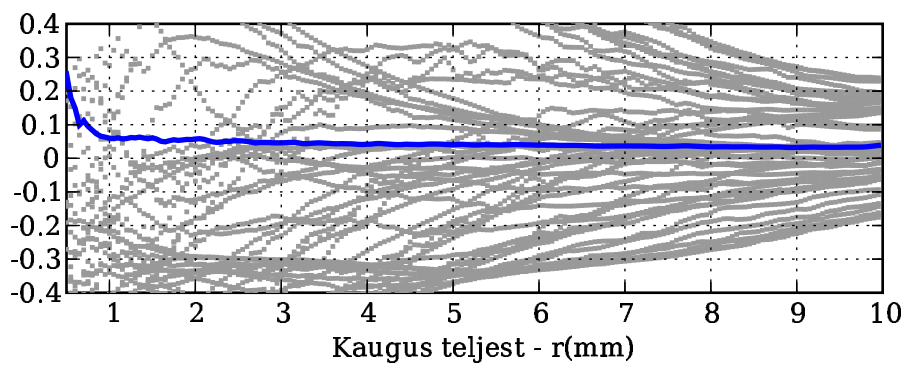
Joonis 6.2: Laengutihedus ruumis

Graafikutel on esitatud arvutatud elektrivälja ja laengutiheduse suhtelised erinevused analüütilistest lahenditest. Väärtuseid on võrreldud ruudustiku $r = 0.50, 0.55, \dots, 10.00 \text{ mm}$, $z = 0.0, 0.2, \dots, 10.0 \text{ mm}$ sõlmedes.

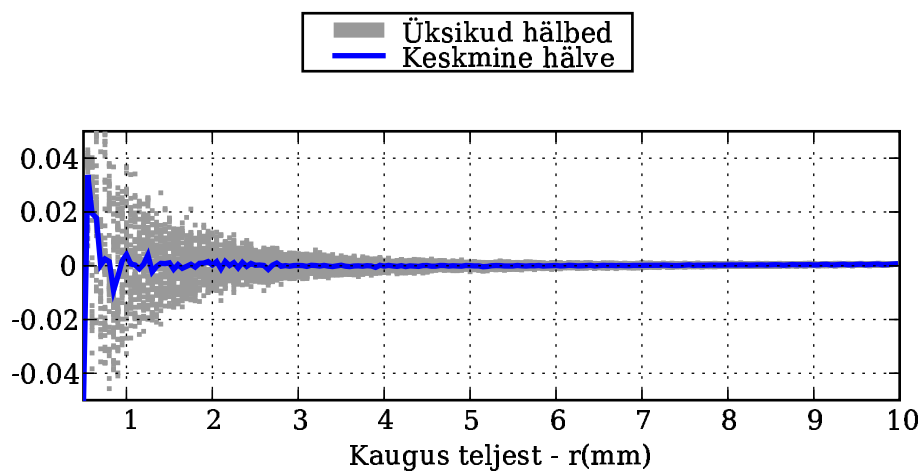
²Reaalsuses on koroonale tekke-elektrivälja määratud keskkonna ja kroneeriva pinna omadustega. Mudelis on võimalik koroonale tekke-elektrivälja vabalt valida.



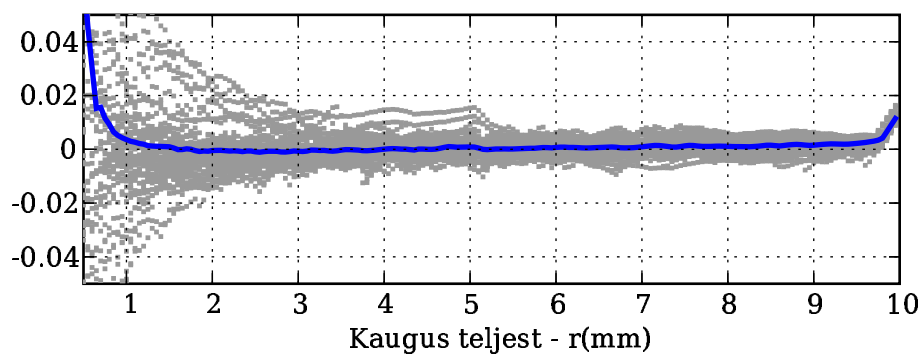
Joonis 6.3: Mudelist arvatatud elektriväljatugevuse suhteline erinevus analüütilisest lahendist – raske juhus



Joonis 6.4: Mudelist arvatatud laengutiheduse suhteline erinevus analüütilisest lahendist – raske juhus



Joonis 6.5: Mudelist arvatatud elektriväljatugevuse suhteline erinevus analüütilisest lahendist – kerge juhus



Joonis 6.6: Mudelist arvatatud laengutiheduse suhteline erinevus analüütilisest lahendist – kerge juhus

Jooniselt 6.2 on näha, et raskemal juhul koroneerivad keskmisel silindril vaid üksikud punktid. See seletab laengutiheduse suure erinevuse analüütilisest lahendist. Samas on see jällegi kooskõlas reaalse koroonaga.

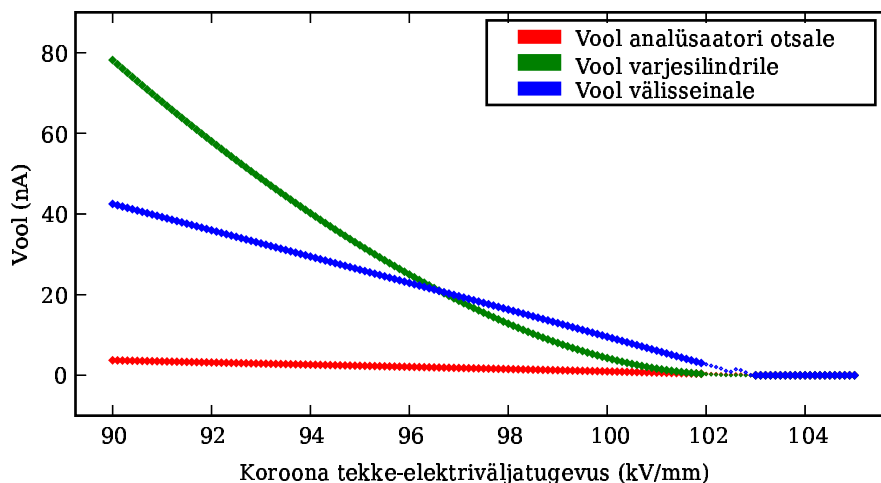
Keskmiised laengutihedused ja elektriväljatugevused langevad analüütilise lahendiga hästi kokku.

6.1.3 Mudeli vastavus reaalse aerosoolilaaduri koroonale

Reaalse laaduri normaalses töörežiimis koroneerib ainult koroonateraviku tipp. Mudeli ääretingimuseks on tarvis määrata sealne koroonatekke-elektriväljatugevus, sest koroneerivate pindade vahetu läheduse täpne simuleerimine polnud antud mudeli eesmärk.

Otseselt seda parameetrit mõõta ei saa. Teraviku tipu kuju on ebaregulaarne ega ole täpselt teada – see on tangidega lõigatud traadi ots. Seega pole võimalik kasutada ka koroneeriva pinna kõverusraadiusest sõltuvaid tekke-elektrivälja hinnanguid.

Seetõttu valiti tekke-elektrivälja parameeter nii, et vastaksid nii mudelis kui reaalses laaduris välimisele elektroodile tulevad koroonaioonidest põhjustatud voolutugevused.



Joonis 6.7: Laaduri erinevatele osadele tulevate voolutugevuste sõltuvus koroonatekke-elektriväljast

Laaduri erinevatele osadele tulevate voolutugevuste sõltuvus korona tekke-elektriväljatugevusest on toodud joonisel 6.7. Graafikul on esitatud tulemused arvutusseeriast, kus varieeriti korona tekke-elektriväljatugevust vahemikus 90 – 105.0 kV/mm sammuga 0.1 kV/mm. Korona kustub umbes 103 kV/mm tekke-elektriväljatugevuse juures. S.t. umbes selline oleks elektriväljatugevus korona teraviku tipus, kui laengud ruumist puuduksid. Selle piiri läheduses on mõned arvutused ebaõnnestunud, s.t. lahend ei koondunud etteantud aja jooksul (graafikul väikesed punktid).

Katsetel selgus, et koroonavoolu tugevus sõltub genereeritud arvutusvõrgust – teraviku tippu ümbritsevate kolmnurkade kujust. Nende kolmnurkade kuju fikseerimine võimaldas seda probleemi vähendada.

6.2 Osakeste laengujaotuse arvutamine

Osakesete laengujaotuste arvutamiseks laadurist väljumisel on tarvis teada nende jaotust laadurisse sisenemisel ning elektrivälja tugevuse ja laengutiheduse jaotust osakeste trajektoiril laaduris.

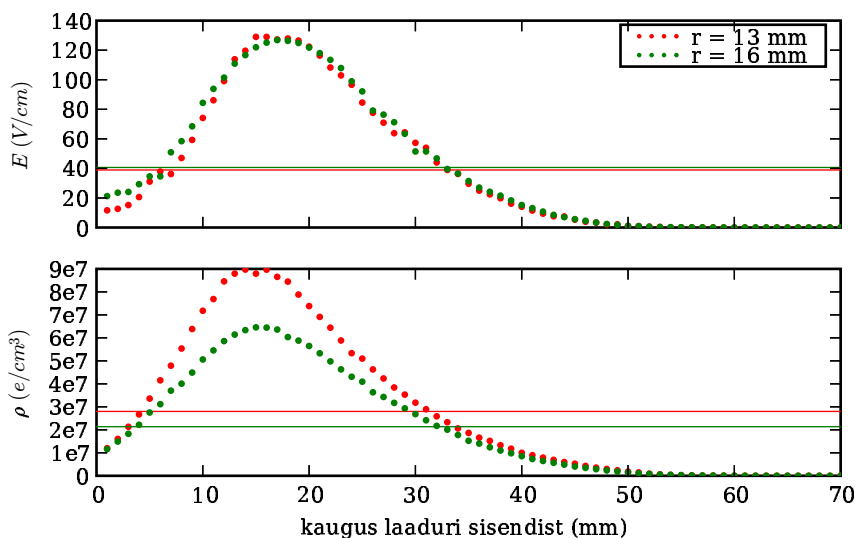
Osakeste täpse trajektoori leidmiseks oleks tarvis modelleerida õhu liikumist laaduris ja arvestada koos selle mõjuga osakese liikumisele ka kulonilisi jõude juba laadunud osakesele. See on oluline, kui on tarvis hinnata väikeste osakeste kadusid laaduris. Antud töös piirduakse lihtsustusega, kus võetakse osakeste trajektooreks laaduri teljega paralleelsed sirged. Edaspidi tähistatakse uuritavaid trajektoore nende kaugustega teljest (r).

Joonisel 6.8 on näidatud tüüpilised elektrivälja ja laengutiheduste väärtused laaduris kahel erineval trajektoiril.

Laengujaotuste leidmiseks kasutatakse momentide integreerimise (ptk. 2.2) meetodit. Numbriliseks integreerimiseks kasutatakse lihtsat Euleri meetodit. Selle puhul jagatakse osakese trajektoor lõplikuks hulgaks lõikudeks ja asendatakse diferentsiaalvõrrandid diferentsiaalvõrranditega:

$$\frac{dx}{dt} = f(x) \longrightarrow \Delta x = f(x) \cdot \Delta t \quad (6.3)$$

Katsetel selgus, et valitud lõigupikkuse (0.5mm, s.o. ~ 5 ms kui osakese kiirus on $100 \frac{mm}{s}$) puhul toimusid arvutused piisavalt kiiresti ja lõigu mitmekordne vähendamine ei muutnud integreerimise lõpptulemust. Seetõttu peeti Euleri meetodit piisavaks ega kasutatud näiteks täpsemat, kuid keerulisemat Runge-Kutta integreerimist.



Joonis 6.8: Elektriväljatugevuse ja laengutiheduse väärtused laaduris erinevatel trajektoridel koos keskmiste väärtustega

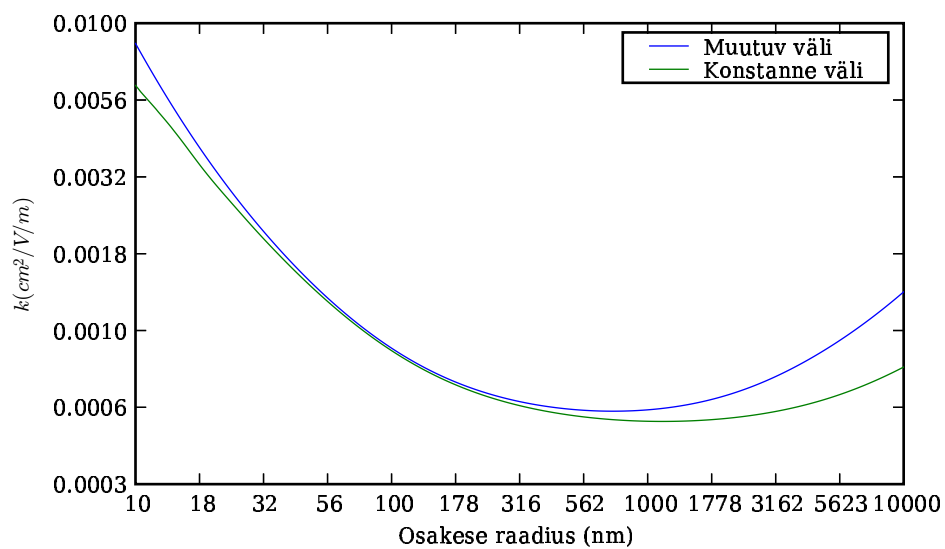
Kasutataval aerosoolijaotuse momentide numbrilisel integreerimisel (valem 2.7 lk. 6) arvutatakse igal lõigulioonivoog (Φ_q) osakesele arvestades antud lõigu keskmist elektriväljatugevust ja laengutihedust. Laengujaotusena (P_q) kasutatakse eelmisel trajektorilõigul leitud jaotust.

Joonisel 6.9 on näidatud osakeste liikuvuse sõltuvus raadiusest juhul, kui elektri- jaioonivälja vaadeldakse osakese kogu trajektoril konstantsetena (kasutatakse ainult keskmisi väljaväärtusi) ja juhul, kui arvestatakse integreerimisel täpset elektri- jaioonivälja jaotust trajektoril (vt. joonis 6.8).

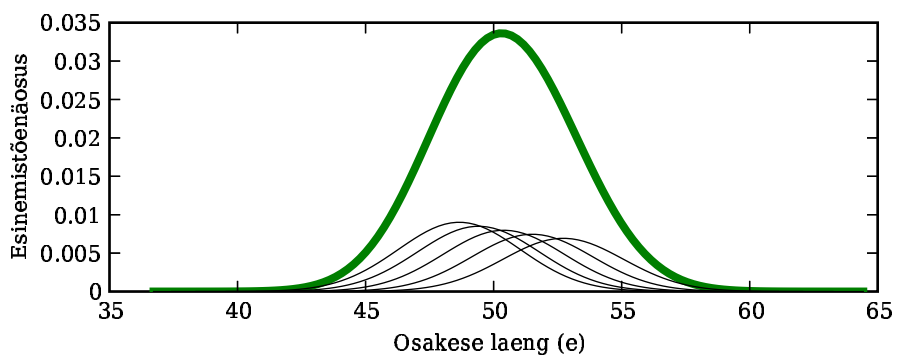
Peamiselt kasutati Aadu Mirme voo avaldist, kuid katsetati ka Fuchsi, Pauthenier ja Noppeli avaldistega.

Et leida osakeste summaarne laengujaotus laaduri väljundis, peab arvestama erinevatel trajektoridel erinevat laadumist. Lahenduses leitakse summaarne jaotus paljudel erinevatel trajektoridel arvutatud jaotuste kaalutud keskmisest arvestades erinevatele trajektoridele vastavate õhukihtide mahte (joonis 6.10).

Selline arvutusmeetod arvestab laaduri nii radiaalset kui pikiteljelist ebahomogeensust. Väikeste osakeste puhul täpsema jaotuse leidmiseks saab momentide integreerimise asendada Salmi valemiga. Meetodit on lihtne täien-



Joonis 6.9: Osakese trajektoori keskmise liikuvuse arvestamisega piirdumise efekt



Joonis 6.10: Summaarne laengujaotus kui erinevatele trajektooridele vastavate laengujaotuste kaalutud keskmine

dada, et modelleerida ka osakeste kadu laaduris, kuid see polnud käesoleva töö ülesanne.

Laengujaotuste leidmise tarkvara on suuremas osas kirjutatud Python keeles [18]. See on teadusarvutustes levinud üldotstarbeline interpreteeritav programmeerimiskeel, mis paistab silma oma lihtsuse, paindlikkuse ja laiendatavusega. Et Python programme interpreteeritakse n.ö. jooksu pealt, võivad need olla mitmeid kordi aeglasemad kui kompileeritavate keelte programmid. Seetõttu kirjutati pikimat arvutusaega nõudvad voogude arvutusprotseduurid C++ keeles ja integreeriti põhiprogrammi Python teegina.

6.3 Laaduri varieerimine

Mingi laaduriruumi või selle ääritingimusi kirjeldava parameetri optimaalse väärtuse leidmiseks arvutatakse laaduri kvaliteedi hinnangud selle parameetri paljude erinevate väärtuste jaoks. Selleks genereeritakse väljamodelleerimistarkvara jaoks igale erinevale parameetri väärtusele vastavad laaduri kuju ja ääritingimusi kirjeldavad konfiguratsioonifailid. Seejärel leitakse kõigi konfiguratsioonide elektri- ja ioonivälja lahendid. Järeltöötlusena arvutatakse neile laadumiskvaliteedi hinnangud.

Erinevate konfiguratsioonide väljade arvutused toimuvad üksteisest täiesti sõltumatult. Seetõttu on neid võimalik jooksutada paralleelselt mitmel arvutil. Kõigi konfiguratsioonide kogu arvutusaeg peaks olema ligikaudu pöördvõrdeline paralleelselt kasutatavate arvutite arvuga.

Muuhulgas ka selle ülesande lahendamiseks seati käesoleva töö autori poolt Tartu Ülikooli keskkonnanafüüsika instituudis üles neljast arvutist koosnev klasterarvuti.

Juhtarvuti genereerib erinevaid laaduri konfiguratsioone, jagab need ülesanneteks alamarvutitele ja kogub arvutustulemused kokku. Et juhtarvutit see protseduur eriti ei koorma, toimib see samas ka ühe alamarvutina.

Konfiguratsioonifailide genereerimiseks esitab kasutaja programmile failivormi, kus on märgitud varieeritavate parameetrite asemele n.ö. lüngad, ning märgib mis vahemikus antud parameetrit varieerida. Lünki võib olla suvaline arv. S.t. arvutused võivad katta mitme parameetri paljusid eri väärtusi. Seega saab leida korraga terve parameetritekomplekti optimaalse väärtuse.

Näiteks arvutusprogrammi konfiguratsioonifaili vormis on järgnevad read kolme erineva pinna ääritingimuse kirjeldamiseks:

```
bc 1 type=constphi phi=0
```

```
bc 2 type=constphi phi=$(shieldpot)
bc 3 type=corona phi=$(pinpot) efld=80
```

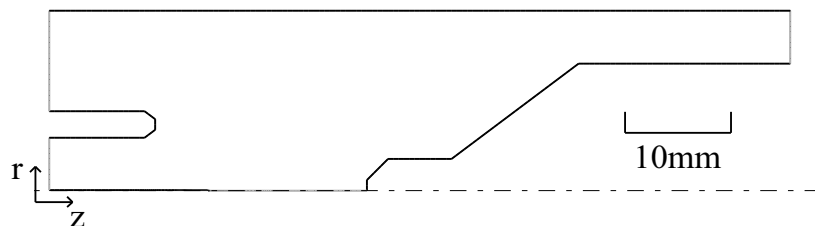
1. ja 2. on lihtsad fikseeritud potentsiaaliga pinnad ja 3. võib koroneerida kui elektriväljatugevus selle lähedal ületab 80 kV/mm. 1. pinna potentsiaali väärtus on null. 2. ja 3. pinna potentsiaali väärtuste asemel on nn. lüngad.

Varieerimise kirjeldamiseks on programmis read:

```
varvars = {
    'shieldpot' : frange(0.0, 1.0, 0.1),
    'pinpot'    : frange(1.0, 2.0, 0.1)
}
```

See näitab, et 2. pinna potentsiaali muudetakse vahemikus 0.0kV kuni 1.0kV sammuga 0.1kV ja 3. pinna oma vahemikus 1.0kV kuni 2.0kV sammuga 0.1kV. Seega genereeritakse igale nende muutujate väärtuste kombinatsioonile vastavad laaduri variandid (s.t. kokku 100), mida seejärel hakatakse klasteri arvutitele lahendamiseks laiali jagama.

Tarkvara on kirjutatud Python keeles. Konfiguratsioonifailide genereerimiseks kasutatakse Cheetah teeki [19]. Arvutitevaheliseks kommunikatsiooniks kasutatakse PyMPI teeki [20], mis omakorda kasutab klasteril töötavat LAM/MPI tarkvara [21].



Joonis 7.1: Katsetes kasutatav aerosoolilaadur (mõõtmed 70mm × 17mm, varjesilindri sisemine raadius 5mm, varjesilindri ja analüsaatori z-suunaline kaugus on 20mm)

7 Tulemused

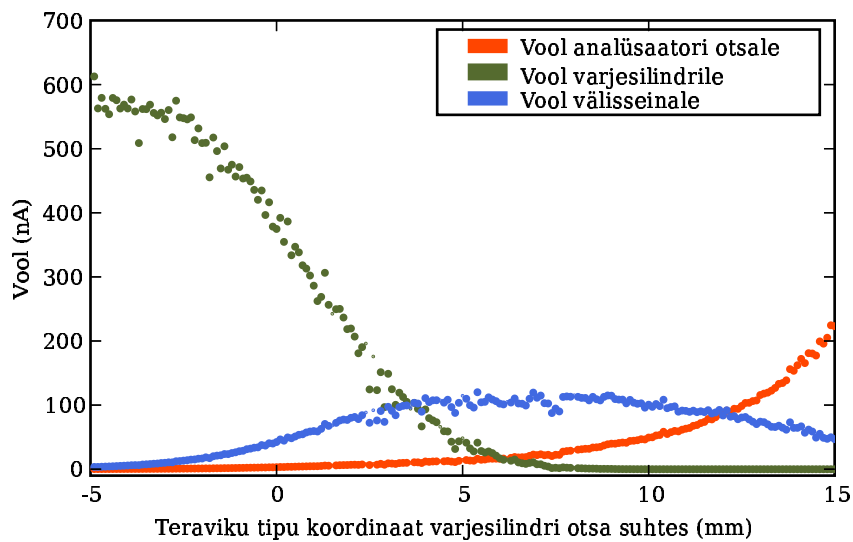
Arvutused teostati TSI Inc. EEPS-3090 spektromeetri laaduri põhjal (joonis 2.1). Selle täpsed geomeetrilised mõõtmed on esitatud joonisel 7.1. Arvutused viidi läbi peatükis 6 kirjeldatud meetodil.

Varieeriti teraviku tipu asukohta laaduri teljel. Nullkoordinaadiks loeti punkt, kus teraviku tipp on kohakuti varjesilindri otsaga. Asukohta muudeti vahemikus -5mm (teravik uputatud silindrisse) kuni 15mm (teravik ulatub silindrist välja ja läheneb analüsaatori otsale) sammuga 0.1mm .

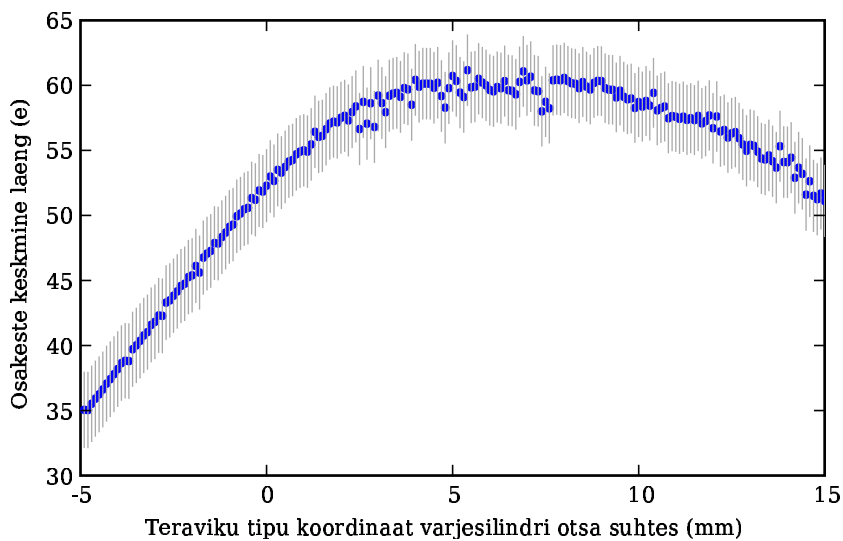
Varieerimisel toimunud erinevatele laaduri osadele tulnud elektrivoolude muudud on toodud joonisel 7.2. Välisseinale tulnud vool on väike kui teravik on uputatud varjesilindrisse ja saavutab maksimumi kui teravik ulatub ligikaudu $5 - 7\text{mm}$ silindrist välja. Vool analüsaatori otsale kasvab monootoonselt kui teravik sellele läheneb. Varjesilindrile minev vool on suurim kui teravik on sellesse uputatud. Selline voolude sõltuvus on täiesti ootuspärane.

Laaduri kvaliteedi hindamisel valiti uuritavaks osakeste suuruseks 500nm . See asub elektrilise spektromeetria jaoks raskeimas suuruste piirkonnas (joonis 5.2 lk. 18). Osakeste keskmise omandatud laengu sõltuvus teraviku tipu asukohast on toodud joonisel 7.3. Osakesed omandavad suurima laengu kui teravik ulatub umbes 5mm silindrist välja. See vastab ka laadimisvoolu (s.o. vool välisseinale) maksimumile (joonis 7.2). Laengujaotuse laius laaduri väljundis peaaegu ei muutu.

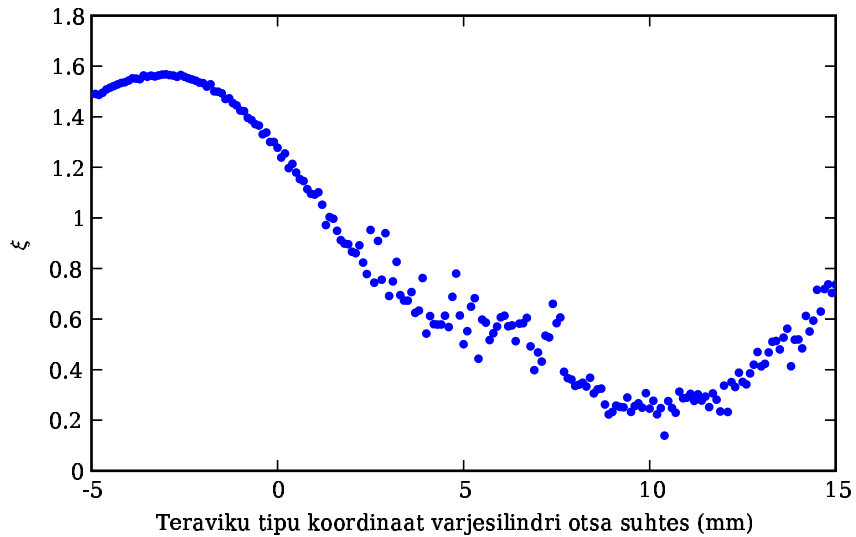
Laadimise kvaliteedi sõltuvus teraviku asukohast on keerulisem (joonis 7.4). Osutub, et kvaliteet on kõige suurem, kui teravik on uputatud silindrisse umbes 3mm . Teraviku väljumisel silindrist kvaliteet kahaneb ja hakkab uuesti kasvama, kui teravik läheneb analüsaatori otsale. Sellise sõltuvuse põhjuseks on ilmselt liikuvuse tuletis raadiuse järgi, sest jaotuse laius eriti ei muutu.



Joonis 7.2: Erinevatele laaduri osadele tulevate voolutugevuste sõltuvus koornateraviku tipu asukohast



Joonis 7.3: Osakeste keskmise laengu ja jaotuse laiuse ($\pm\sigma$) sõltuvus koornateraviku tipu asukohast



Joonis 7.4: Laadimise kvaliteedi sõltuvus koroonateraviku tipu asukohast

Antud simulatsioon on tehtud küllalt suurte laadimisvoolude (üle 50na) juures, kus 500nm osakesed saavutavad kuni 60e laengu. Sellisel juhul toimuv liikuvuskõvera lamene mine ongi ilmselt kvaliteedilanguse põhjuseks [6]. Väiksemate voolude juures oleks see sõltuvus ilmselt erinev. Voolude vähendamisel peaks kasutama tihedamat arvutusvõrku, mis omakorda suurendaks arvutusaega. Võrgu tihendamise vajadusele viitavad ka hinnanguparameetrite fluktuatsioonid.

8 Kokkuvõte

Aerosooli spektromeetri võimete piirid on määratud aerosooli laadimise kvaliteediga. Unipolaarses koroonalaaduris sõltub osakese poolt omandatud laeng elektri- ja ioniväljast selle trajektoorigil. Optimaalse laaduri kuju ja töörežiimi saab projekteerida ainult siis, kui mõlemad väljad on terves laaduris teada ja saab arvutada laadurit läbivate osakeste laengujaotused.

Elektri- ja ionivälja jaotuste leimiseks silindersümmeetrilises koroonalaaduris töötati välja lõplike ruumala meetodil baseeruv numbriline mudel. Statsionaarsed välja väärtused leitakse iteratiivselt kolmnurvõrgul. Poissoni võrrandi lahendamiseks kasutatakse relaksatsiooni. Ioonide kontsentratsiooni leidmiseks simuleeritakse laengute voogu ruumielementide (nn. laengukogumite) vahel. Iteratiivse lahendi stabiliseerimiseks arvestatakse ionide liikumiskiirusega, s.t. elektriväljatugevusega – raskemaid piirkondi (näiteks koroonateraviku lähedus) simuleeritakse hoolikamalt. Selle meetodiga saab kergesti modelleerida suvalise kujuga laadureid.

Laadurit läbivate osakeste laengujaotused leitakse integreerides jaotuse momente mööda osakeste trajektoore. Arvestatakse täpse elektri- ja ionivälja jaotusega ruumis. Osakeste laengujaotus laaduri väljundis leitakse paljudel erinevatel trajektoorigil arvutatud laengujaotuste kaalutud keskmisest. Kvaliteedihinnang leitakse laadurile arvestades jaotuse standardhälvet ja osakese elektrilise liikuvuse sõltuvust osakese läbimõõdust.

Numbriline väljaarvutusmudel, järeltöötlus ja kvaliteedi hindamine realiseeriti tarkvarapaketina. Lisaks loodi tarkvara paljude laadurikonfiguratsioonide automaatseks genereerimiseks ja nende kvaliteedi hindamiseks paralleel-arvutil.

Meetodit rakendati firma TSI Inc. EEPS-3090 spektromeetri laaduri uurimisel. Arvutatud laadimiskvaliteedi sõltuvus koroonateraviku tipu asukohast on füüsikaliselt usutav.

Viited

- [1] Mirme, A. *Electric Aerosol Spectrometry, Ph.D Thesis*, Tartu, 1994
- [2] Tammet, H. *The Aspiration Method for the Determination of Atmospheric-Ion Spectra*, Jerusalem, 1970.
- [3] Fuchs, N.A. Atmosfäärsete aerokolloidide osakeste poolt kantud elektrilaengute suurustest. *Izv. AN SSSR, ser. geogr. i geofiz.*, 1947, **11**, 4, 341 – 348. (vene keeles)
- [4] Pauthenier, M., Morea-Hnot, M. La charge des particules sphériques dans un champ ionisé. *J. de Phys. et le Radium*, 1932, **3**, 12, 590 – 613
- [5] Noppel, M. Aerosooliosakeste laadimine ja tagasilaadimisest tugevates elektriväljades. *Acta et Comm. Univ. Tartuensis*, 1984, **669**, 25 – 30. (vene keeles)
- [6] Tammet, H. On the Techniques of Aerosol Electrical Granulometry. *Acta et Comm. Univ. Tartuensis*, 1992, **947**, 94 – 115.
- [7] Noppel, M., Tamm, E. Unipolaarselt laetud osakeste tagasilaadimisest. *Acta et Comm. Univ. Tartuensis*, 1980, **534**, 84 – 94. (vene keeles)
- [8] Salm, J. Unipolar Charging of Initially Charged Aerosol. *Acta et Comm. Univ. Tartuensis*, 1992, **947**, 68 – 71.
- [9] Noppel, M. Tugevas elektriväljas laadunud aerosooliosakeste jaotusest. *Acta et Comm. Univ. Tartuensis*, 1985, **707**, 79 – 83. (vene keeles)
- [10] Noppel, M. Väikeste õhuhioonidega laetud aerosooliosakeste jaotusest. *Acta et Comm. Univ. Tartuensis*, 1987, **631**, 85 – 93. (vene keeles)
- [11] Mirzabekyan, G.Z. Aerosooli laadimine koroonaväljas. *Tugevates elektriväljades tehnoloogilistes protsessides*, Energia, 1969, 28 – 30
- [12] Zhou, P. *Numerical Analysis of Electromagnetic Fields*, Springer-Verlag, 1993.
- [13] Vereshagin, I. P. *Osnov elektrogazodinamiki dispersnõh sistem*, Energia, Moskva, 1974.

- [14] Kallio, G. A., Stock, D. E. Computation on electrical conditions inside wire-duct electrostatic precipitators using a combined finite-element, finite-difference technique. *Journal of Applied Physics*, 1986, **59**, 6, 1799 – 1806
- [15] Abdel-Salam, M., Al-Hamouz, Z. Finite element analysis of monopolar ionized fields including ion diffusion. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 1993, **26**, 2202 – 2211
- [16] Mirme, S. *Elektri- jaioonivälja modelleerimine aerosoolispektromeetri laaduris, bakalaureusetöö*, Tartu, 2003.
- [17] Tamm, E. Aerosooliosakeste funktsionaalsest laadumisest. *Acta et Comm. Univ. Tartuensis*, 1975, **348**, 35 – 55. (vene keeles)
- [18] Python Programming Language. (<http://www.python.org/>). 23.05.2005
- [19] Cheetah Template Engine. (<http://www.cheetahtemplate.org/>). 23.05.2005
- [20] PyMPI Project. (<http://pympi.sourceforge.net/>). 23.05.2005
- [21] LAM/MPI Parallel Computing. (<http://www.lam-mpi.org/>). 23.05.2005

Modelling the effect of charger geometry on aerosol charge distribution in an aerosol spectrometer

The performance of an electrical aerosol spectrometer depends on the quality of aerosol charging. The charge acquired by an aerosol particle in a unipolar corona charger is a function of ion concentration and electric field strength along its path. The optimal geometry and operation regime can only be designed if the details of the distributions of both fields in the charger are known and charge distributions of particles passing through the charger are calculated.

A numerical model based on the finite volume method was developed for calculating the distribution of electric and ionic fields in a cylindrically symmetrical corona charger. The stationary field values are found iteratively on a triangular mesh. The Poisson equation is solved using relaxation. Ion concentration is found by simulating the charge flow between the finite volumes – the so called charge batches. The speed of the ions i.e. the strength of electric field is taken as a guide for stabilizing the iterative solution – more difficult regions (e.g. the proximity of the corona needle) are simulated more carefully. Chargers of arbitrary shape can easily be simulated with this method.

The charge distributions of particles passing through the charger, are found by integrating the distribution moments along the trajectory of a particle. The distribution of electric- and ionic fields is taken into account. The final charge distribution is taken as a weighted average of distributions found on a number of different particle trajectories. A quality assessment is made based on the standard deviation and dependence on particle diameter of particle electrical mobility.

Numerical field calculation model, post-processing and quality assessment implemented as a software package. Additionally software to automatically generate and assess the quality of many different chargers on a parallel-computer was developed.

The method was used to find the dependence of charging quality on the length of the corona needle in the charger of TSI Inc. model 3090 EEPS spectrometer. The calculated dependence is physically plausible.