

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УДК 519.62/.64
N госрегистрации 01201356265

УТВЕРЖДЕН
Протоколом заседания
Ученого совета
от 17.02.2015 № 3/2015

Председатель Ученого совета
член-корреспондент РАН
_____ В. В. Шайдуров
" ___ " _____ 2015 г.

ОТЧЕТ О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

БАЗОВЫЙ ПРОЕКТ IV.36.1.1 "РАЗРАБОТКА ИНФОРМАЦИОННО-
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ СЛОЖНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ И
ПРОЦЕССОВ В БЛИЖНЕМ КОСМОСЕ" ПРОГРАММЫ СО РАН IV.36.1 "НОВЫЕ
РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМ ИССЛЕДОВАНИЯ И МАТЕМАТИЧЕСКОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ СЛОЖНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ И ПРОЦЕССОВ И ИХ
ПРИЛОЖЕНИЯ В ЗАДАЧАХ ПРОЕКТИРОВАНИЯ, АВТОМАТИЗАЦИИ И
УПРАВЛЕНИЯ". № ГОС. РЕГИСТРАЦИИ 01201356265.

(промежуточный)

Руководитель темы
член-корреспондент РАН

_____ В.В. Шайдуров
" ___ " _____ 2015 г.

Красноярск 2015

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель темы член-корреспондент РАН	_____	В.В. Шайдуров
	(подпись, дата)	
Исполнители:	_____	Г.Г. Крушенко
г.н.с., д.т.н.	(подпись, дата)	
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____	Г.И. Щепановская
	(подпись, дата)	
уч. секр., к.ф.-м.н.	_____	А.В. Вяткин
	(подпись, дата)	
н.с., к.ф.-м.н.	_____	Л.В. Гилева
	(подпись, дата)	
м.н.с.	_____	М.В. Якубович
	(подпись, дата)	
н.с., к.ф.-м.н.	_____	Е.В. Дементьева
	(подпись, дата)	
зав. отд., д.ф.-м.н.	_____	Н.В. Еркаев
	(подпись, дата)	
в.н.с., д.ф.-м.н.	_____	В.В. Денисенко
	(подпись, дата)	
в.н.с., д.ф.-м.н.	_____	И.В. Краснов
	(подпись, дата)	
в.н.с., д.ф.-м.н.	_____	А.П. Гаврилюк
	(подпись, дата)	
н.с., к.ф.-м.н.	_____	Л.П. Каменщиков
	(подпись, дата)	
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____	В.А. Деревянко
	(подпись, дата)	
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____	Е.Н. Васильев
	(подпись, дата)	
ведущий инженер	_____	А.В. Макуха
	(подпись, дата)	
старший инженер	_____	С.В. Кукушкин
	(подпись, дата)	
инженер	_____	А.А. Пустынский
	(подпись, дата)	
инженер	_____	Д.П. Емельянов
	(подпись, дата)	
Нормоконтролер	_____	А.В. Вяткин
	(подпись, дата)	

РЕФЕРАТ

Отчёт 26 с., 13 рис., 1 прил.

ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ, ДВУХФАЗНЫЙ ТЕПЛОВОЙ КОНТУР, ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ, ИОНОСФЕРА, ТЕЧЕНИЕ ПЛАЗМЫ, МАГНИТОСФЕРА ЗЕМЛИ, УРАВНЕНИЯ НАВЬЕ-СТОКСА, ОПТИЧЕСКОЕ МАНИПУЛИРОВАНИЕ, РЕЗОНАНСНЫЕ ЧАСТИЦЫ

Проект направлен на реализацию информационно-вычислительных моделей для моделирования сложных динамических процессов. Планируется: создать информационно-вычислительную динамическую модель работы двухфазного контура с капиллярным насосом, позволяющую проводить вычислительный эксперимент для расчета теплового режима бортовых реальных и перспективных конструкций космических аппаратов; создать вычислительный метод решения задачи электропроводности для проводника атмосфера – ионосфера Земли для построения информационно-вычислительной модели проникновения грозových электрических полей в ионосферу; исследовать особенности течения плазмы вблизи границы магнитосферы для различных направлений и интенсивностей межпланетного магнитного поля на основе трехмерной магнитогазодинамической модели обтекания магнитосферы Земли; исследовать нелинейные "флэппинг"-колебания токового слоя магнитосферного хвоста с учетом влияния ионосферной проводимости; создать информационно-вычислительную технологию решения уравнений Навье-Стокса для вязкого теплопроводного газа, включающую комплекс программ с новыми вычислительными методами, превышающими по точности и эффективности методы, используемые в настоящее время; разработать математические и компьютерные модели для описания характеристик и режимов работы новых эффективных методов оптического манипулирования, основанных на нелинейных резонансных оптических явлениях: чисто оптических ловушек для ионов, оптических манипуляторов для резонансных частиц со свойствами "тянущих" световых пучков, лазерного охлаждения кулоновских систем с резонансными частицами, фотомодификации наночастиц и их агрегатов.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
1 Проведение вычислительных экспериментов по работе виртуальной системы терморегулирования на двухфазных контурах и исследование алгоритмов управления режимом её работы на космических аппаратах.....	6
2 Численное магнитогидродинамическое (МГД) моделирование процесса прохождения фронтов смены направления межпланетного магнитного поля через переходный слой от ударной волны к магнитопаузе	7
3 Разработка технологии концентрации вычислений на определении важных параметров решения уравнений Навье-Стокса с помощью дифференциальных уравнений, сопряженных относительно целевого функционала.....	13
4 Построение математических моделей «тянущего» бихроматического оптического пучка для резонансных частиц и моделирование долговременной динамики ионов в трехмерной полихроматической оптической сверхрешетке.....	16
5 Моделирование взаимодействия резонансных плазмонных нано-кластеров с импульсным лазерным излучением и поглощения-рассеяния излучения в разлетающейся резонансной среде	18
6 Совершенствование технологий производства материалов двигателей летательных аппаратов.....	22
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	24
ПРИЛОЖЕНИЕ А	25

ВВЕДЕНИЕ

В соответствии с планом работ на 2015 г. проводились следующие исследования.

1. Проведение вычислительных экспериментов по работе виртуальной системы терморегулирования на двухфазных контурах и исследование алгоритмов управления режимом её работы на космических аппаратах.

2. Численное магнитогидродинамическое моделирование процесса прохождения фронтов смены направления межпланетного магнитного поля через переходный слой от ударной волны к магнитопаузе.

3. Разработка технологии концентрации вычислений на определении важных параметров решения уравнений Навье-Стокса с помощью дифференциальных уравнений, сопряженных относительно целевого функционала.

4. Построение математических моделей «тянущего» бихроматического оптического пучка для резонансных частиц и моделирование долговременной динамики ионов в трехмерной полихроматической оптической сверхрешетке.

5. Моделирование взаимодействия резонансных плазмонных нано-кластеров с импульсным лазерным излучением и поглощения-рассеяния излучения в разлетающейся резонансной среде.

6. Совершенствование технологий производства материалов двигателей летательных аппаратов.

1 Проведение вычислительных экспериментов по работе виртуальной системы терморегулирования на двухфазных контурах и исследование алгоритмов управления режимом её работы на космических аппаратах

Проведено вычислительное моделирование двухфазных тепловых контуров с пассивной циркуляцией теплоносителя с целью анализа работы опытных образцов ДФК-СТР, разработанных в ОАО «Информационные спутниковые системы» имени академика М. Ф. Решетнёва» (Россия, г. Железногорск). Для моделирования использована термодинамическая модель, позволяющая проводить исследования нестационарных процессов в рассматриваемых двухфазных контурах. Сравнение расчетных и экспериментальных данных показало, что модель адекватно описывает наблюдаемые на экспериментальных образцах процессы, в том числе, автоколебательные явления, и может использоваться для исследования работы двухфазных тепловых контуров в динамике.

Разработана динамическая вычислительная модель двухфазных контуров системы терморегулирования с пассивной циркуляцией теплоносителя, которая позволяет рассчитывать зависимость температуры и давления элементов контура от времени при различной мощности, подаваемой к капиллярному насосу, мощности нагрева гидроаккумулятора и интенсивности охлаждения конденсатора. В ходе вычислительных экспериментов выявлены колебательные явления, возникающие в контуре при работе без рекуператора. Осцилляции температуры вызваны периодическим перемещением границы полной конденсации теплоносителя по каналу конденсатора вследствие запаздывающего воздействия на компенсационную полость переохлажденного конденсата, который накапливается в жидкостной линии. Результаты моделирования показали, что возможность возникновения колебаний, а также их интенсивность и частота зависят от многих характеристик контура. Наиболее важным параметром является объем жидкостной магистрали, увеличение которого приводит к возникновению колебаний (рисунок 1). Увеличение теплоемкостей источника тепла и конденсатора также способствуют возникновению колебаний. Увеличение теплоемкости компенсационной полости, наоборот, приводит к снижению интенсивности осцилляций. Существенное влияние оказывает эффективность отвода тепла от конденсатора. Снижение коэффициента теплообмена между конденсирующимся теплоносителем и окружающей средой способствует возникновению колебаний.

Результаты моделирования показали, что дополнительный подвод тепла к компенсационной полости приводит к более устойчивой работе контура. Использование

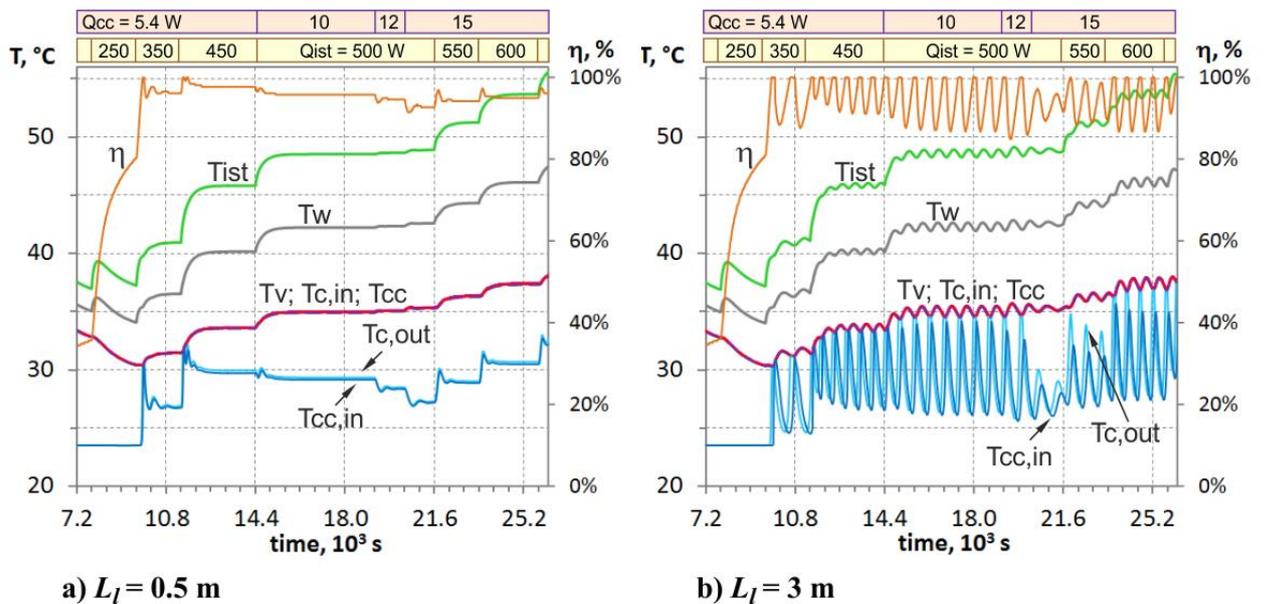


Рисунок 1 – Результаты моделирования с разным значением длины жидкостной магистрали

ускорить его конденсацию, а следовательно, увеличить часть канала конденсатора, заполненную жидким теплоносителем (длину области переохлаждения). Это приводит к более устойчивой работе контура. Использование нагревателя компенсационной полости также позволяет осуществлять регулировку температуры источника тепла. С помощью термодинамической модели проведена серия вычислительных экспериментов по исследованию влияния характеристик элементов контура на автоколебательные процессы. Выявлено, что увеличение теплоемкости источника тепла, а также уменьшение теплоемкости компенсационной полости способствуют возникновению колебаний. Тепловая инерционность радиатора также играет существенную роль в возникновении колебательных процессов в контуре. Изменение теплоемкостей указанных элементов приводит к изменению частоты и интенсивности колебаний, а их определенное сочетание, по-видимому, является «оптимальным» для самовозбуждающихся автоколебаний.

2 Численное магнитогидродинамическое (МГД) моделирование процесса прохождения фронтов смены направления межпланетного магнитного поля через переходный слой от ударной волны к магнитопаузе

Разработана численная МГД модель драпировки искривленных магнитных силовых линий вокруг магнитосферы Земли, обтекаемой солнечным ветром. Исследовано влияние межпланетного магнитного поля (ММП) на поведение скорости, плотности, температуры и давления газа в области обтекания. Показано значительное усиление магнитного давления вблизи обтекаемой границы, сопровождающееся увеличением

модуля скорости и уменьшением теплового давления. На основе численной модели рассчитаны следующие параметры: характерное время переноса фронта смены направления ММП от головной ударной волны до границы магнитосферы, время формирования магнитного барьера перед границей магнитосферы, скорость магнитного пересоединения на границе магнитосферы.

Получен новый эффект формирования медленных ударных магнитогидродинамических (МГД) волн вблизи обтекаемой границы. Данный эффект выявлен в результате выполнения серии расчетов МГД обтекания солнечным ветром магнитосферы для различных значений межпланетного магнитного поля. Особое внимание уделялось формированию ускоренных потоков плазмы в магнитослое под влиянием сил натяжения искривленного магнитного поля. Расчеты показали, что плазма в магнитослое может значительно ускоряться искривленным межпланетным магнитным полем, драпирующимся вокруг магнитосферы. При этом скорость потока может значительно превышать скорость невозмущенного солнечного ветра. Это превышение может достигать 60%. Эффект ускорения выражен тем сильнее, чем меньше значение параметра Маха-Альфвена (Ma) в солнечном ветре. Область ускоренного потока существенно зависит от направления межпланетного магнитного поля.

При северном направлении наибольшее ускорение отмечается в экваториальной области. С целью экспериментальной проверки модельных расчетов был выполнен статистический анализ спутниковых данных об обтекании солнечным ветром магнитосферы Земли. Специально анализировались факты, свидетельствующие о значительном ускорении плазмы солнечного ветра в области хвоста магнитосферы. Данные об ускоренных потоках хорошо согласуются с предложенной математической моделью. В предположении северного направления ММП показано зарождение и постепенное усиление фронтов повышения плотности и давления газа, эволюционирующих в ударные волны в области хвоста магнитосферы, примерно на расстоянии 60-ти радиусов Земли (R_E). Эти ударные фронты распространяются вдоль силовых линий магнитного поля от экватора и одновременно сносятся потоком в антисолнечном направлении. Они характеризуются резким увеличением плотности плазмы, давления и температуры, а также снижением модуля скорости и напряженности магнитного поля. Уменьшение магнитного давления на фронтах сопровождается одновременным увеличением давления плазмы при сохранении полного давления (суммы магнитного и газового давлений). Рост плотности сопровождается падением продольной компоненты скорости при сохранении поперечной компоненты скорости. Для северного направления ММП рассматриваемые фронты медленных МГД волн появляются в экваториальной области и далее распространяются в

более высокие широты. Этот эффект существенно усиливается при увеличении интенсивности ММП, однако он не очень чувствителен к вариациям формы магнитосферы. При отклонении ММП от северного направления область зарождения медленных ударных МГД фронтов смещается пропорционально углу поворота вектора ММП. На рисунке 2 показано распределение линий тока и магнитных силовых линий

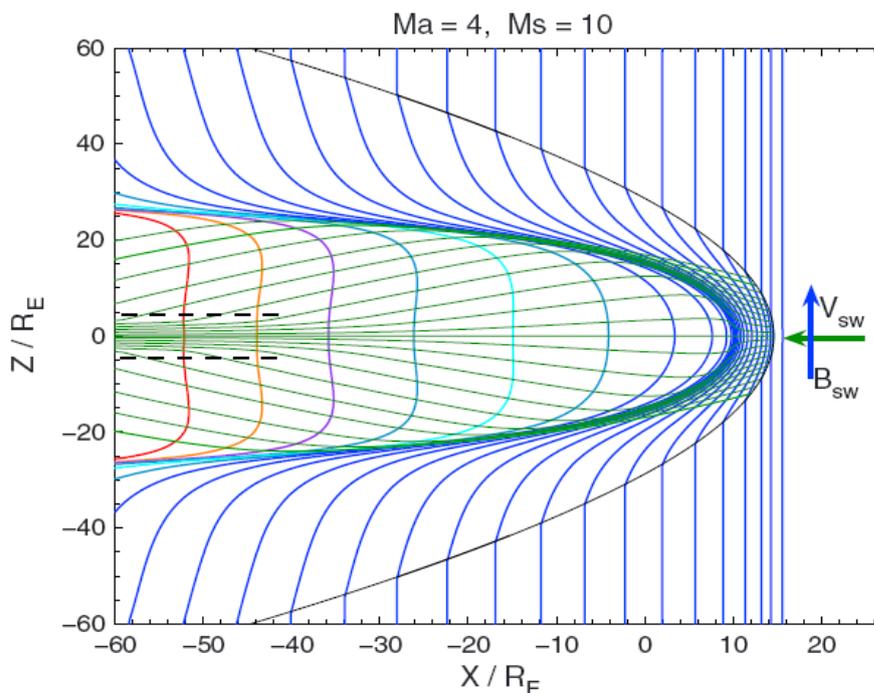


Рисунок 2 – Линии тока и магнитные силовых линии в проекции на плоскость XZ

в проекции на плоскость XZ. Начало координат находится в центре Земли, ось X направлена на Солнце. Ось Z направлена на Север. Линии тока на поверхности обтекания окрашены в зеленый цвет. Участки магнитных силовых линий на поверхности обтекания показаны разными цветами (от голубого до красного). В остальных областях магнитные линии имеют синий цвет. Фронты образовавшихся медленных ударных МГД волн показаны отрезками черных штриховых линий. Значения координат даны в единицах радиуса Земли. На рисунке 3 показан процесс эволюции ударных фронтов на профилях плотности n , давления плазмы P и магнитного давления P_m вдоль магнитных силовых линий. Каждый профиль соответствует совпадающей по цвету определенной магнитной силовой линии, показанной на рисунках 2 и 3. Отчетливо виден постепенный рост градиентов плотности и давления до стадии ударного фронта. Также видна характерная антикорреляция давлений плазмы и магнитного поля.

Изменения параметров солнечного ветра вызывают нестационарные вариации параметров плазмы и магнитного поля в области обтекания – магнитослое. Это может

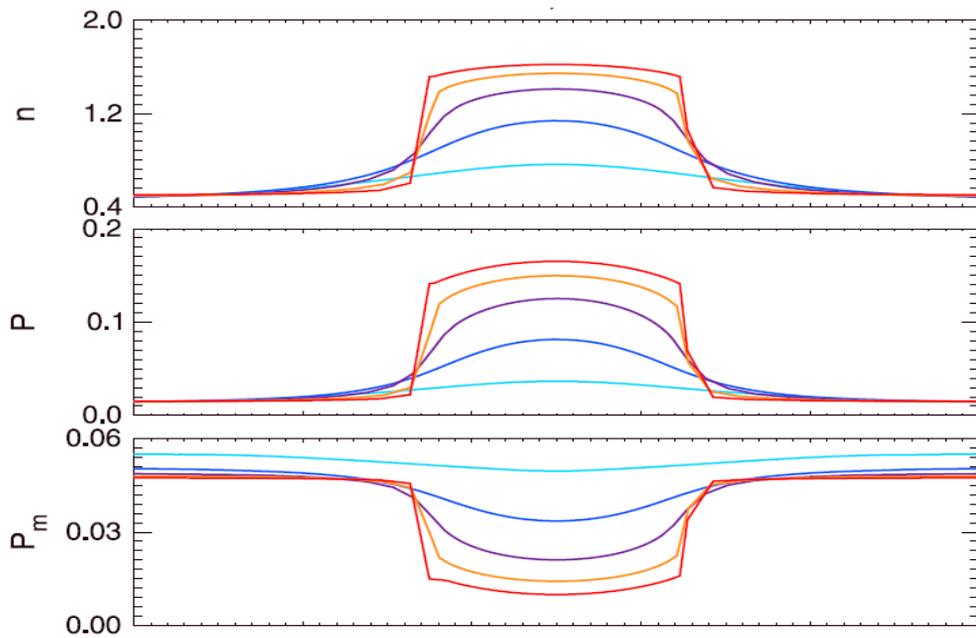


Рисунок 3 – Возникновение ударных фронтов

приводить к существенным деформациям границы магнитосферы, особенно в области магнитосферного хвоста. Нестационарные возмущения на границе магнитосферы являются одной из причин возбуждения собственных колебаний плазменного слоя хвоста магнитосферы. В этой связи проведено численное исследование моды "двойного градиента", которая связана с "флэппинг" колебаниями магнитосферного хвоста – поперечными низкочастотными колебаниями магнитосферного плазменного слоя. Эти моды довольно медленно (на порядок медленнее, чем альфвеновские волны) распространяются от центра токового слоя к его флангам с типичной скоростью порядка 20-60 км / с, с амплитудой 1-2 Re и квазипериодом 2-10 мин. Данная мода становится неустойчивой в области, где нормальная к токовому слою компонента магнитного поля растет в направлении хвоста. Детально исследовано поведение изгибающей («kink») ветви данной моды на фоне равновесной конфигурации. На первом этапе неустойчивость исследовалась в рамках линеаризованной постановки задачи. Полученные численные результаты были в удовлетворительном согласии с полученными ранее аналитическими оценками инкремента. Также собственные функции, найденные с помощью упрощенной аналитической теории, подобны найденным в результате численных экспериментов. Далее, линейный численный анализ был дополнен полным трехмерным нелинейным МГД моделированием. Неустойчивость инициировалась на фоне равновесной конфигурации, которая также определялась методом численной релаксации. Показано, что токовый слой с "обратным" градиентом B_z компоненты магнитного поля неустойчив относительно изгибных деформаций с длинами волн, превышающими радиус кривизны магнитного

поля. Когда градиент V_z компоненты меняет знак в пределах токового слоя, сегмент слоя с "нормальным" градиентом V_z (направленным к Земле) оказывает глобальное стабилизирующее влияние на весь слой. В этом случае общий инкремент неустойчивости близок к теоретическому значению, усредненному по всей расчетной области. Линейная стадия эволюции достигает насыщения, когда система переходит в нелинейный режим. Время выхода на нелинейную стадию в 130 раз превышает альфвеновское время. Кроме хорошо изученной несимметричной «kink» моды в принципе может возбуждаться и другая, симметричная («sausage») мода колебаний, которая имеет меньший инкремент неустойчивости. Для определения типа экспериментально наблюдаемых колебаний был предложен метод идентификации мод «флэппинг» колебаний по имеющимся данным измерений вращения магнитного вектора, полученным на борту космических аппаратов Cluster и THEMIS. Новый метод был применен для выяснения возможности разделения колебательных мод на основе анализа временных вариаций азимутальной и нормальной компонент скорости плазмы. При распространении колебаний в каждой фиксированной точке плазменного слоя вектор скорости плазмы вращается либо по часовой стрелке, либо против. Направление вращения различно для антисимметричной и симметричной мод колебаний. С учетом этого свойства была проанализирована зависимость от времени угла поворота вектора скорости ($\arctan(V_y / V_z)$), которая представляет собой серию прямых, имеющих разный наклон для различных мод. По углам наклона, построенным на основе экспериментальных данных, определялись частоты колебаний. При анализе данных наблюдений было отобрано наиболее подходящее событие, имевшее место 5-го марта 2008 г., в котором расположение зондов THEMIS было оптимальным для идентификации и исследования волн типа «флэппинга». Для этого события оказалось возможным выделить три последовательных периода вращения вектора скорости, связанного с волной. Период вращения составил 12 минут. Характер вращения соответствовал теоретическим ожиданиям обнаружить изгибающую моду при данном расположении зонда. Установлено, что наклон линий в точности соответствует случаю изгибающей «kink» моды колебаний, предсказываемой нашей математической моделью. Однако следует заметить, что в математической модели магнитный вектор также должен вращаться аналогично вектору скорости. Но ожидаемых наклонных линий для зависимости угла поворота магнитного вектора от времени не было обнаружено при анализе экспериментальных данных. В этой связи была также исследована возможность применения нашего метода в случае смешанных мод в присутствии шумовых помех. В результате установлено, что данный способ разделения мод становится несостоятельным при наличии достаточно большого уровня шума. Однако благоприятным и обнадеживающим является тот факт,

что поведение скорости более стабильно и менее подвержено шумовым помехам, нежели поведение вектора магнитного поля. Поэтому для диагностики типа мод колебаний предпочтительнее использовать экспериментальные данные о поведении вектора скорости. Помимо шума, множественность источников колебаний может также существенно затруднить диагностику. Процессы на границе и в хвосте магнитосферы существенно влияют на электрические поля и токи в ионосфере Земли. В связи с этим усовершенствована математическая модель электрической связи магнитосферных объектов с ионосферой. Электрические поля проецируются в ионосферу вдоль геомагнитных силовых линий, которые считаются эквипотенциальными и рассчитываются с помощью созданной ранее модели магнитосферного магнитного поля. Ионосфера в свою очередь взаимодействует с атмосферой посредством электрических токов и полей. В этой связи усовершенствована построенная ранее математическая модель проникновения электрического поля из ионосферы в атмосферу в спокойных геомагнитных условиях и во время суббурь. Созданы также модели проникновения в ионосферу электрического тока из отдельного грозового облака. Эти модели описывают облака, расположенные как в средних широтах, так и в экваториальной атмосфере. Определены области в ионосфере, в которые втекают эти токи. Наиболее широкие области получаются над облаками, вытянутыми поперёк геомагнитного экватора, что объясняется ролью холловской проводимости. Тем самым получен вклад отдельного облака в глобальную электрическую цепь. Построена математическая модель ионосферных электрических полей, обусловленных глобальной грозовой активностью. Для численной реализации модели использована декомпозиция проводящей области на ионосферный проводник, для которого справедливо двумерное приближение, и атмосферный проводник с изотропной проводимостью. Оценена погрешность такого приближения. На рисунке 4 показаны конкретные результаты расчета для случая горизонтального магнитного поля в экваториальной плоскости. Расчеты основаны на разработанной модели проникновения электрического тока из грозового облака в экваториальную ионосферу. Сверху на рисунке 4 показан электрический потенциал, снизу – токовые линии для суммарного тока, полученного сложением тока проводимости с внешним током. Шаг между линиями – 10^7 А/м. При проведении расчетов использовались эмпирические модели атмосферной и ионосферной проводимости. Результаты показывают, что в основной части атмосферы, находящейся ниже 60 км, электрические поля и токи не зависят от наклона магнитного поля. Разность потенциалов в облаке порядка 10 мегавольт создается вертикальным внешним током $J_{ext} = 110$ pA/m². При этом

полный ток в ионосферу составляет 30% от полного внешнего тока в облаке, имеющего горизонтальный размер порядка 40 км.

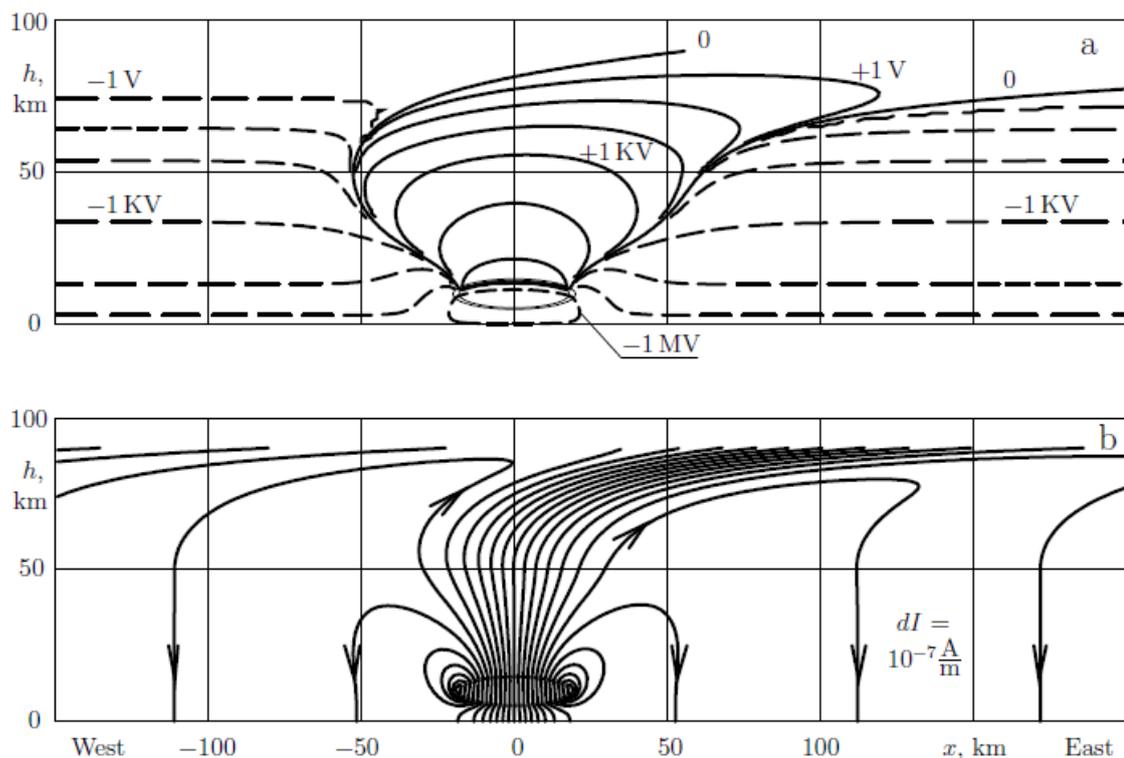


Рисунок 4 – Электрический потенциал и токовые линии

Данные величины довольно чувствительны к выбору модели проводимости. Однако проводимость внутри облака не является хорошо известным параметром. Атмосферные токи замыкаются в экваториальной ионосфере ниже средних широт. Выше 80 км эти токи поворачиваются в направлении горизонтали, если облако вытянуто вдоль магнитного экватора. Если облако расположено перпендикулярно к магнитному экватору, то область втекания тока в ионосферу смещается на 100 км к востоку от облака благодаря влиянию холловской проводимости.

3 Разработка технологии концентрации вычислений на определении важных параметров решения уравнений Навье-Стокса с помощью дифференциальных уравнений, сопряженных относительно целевого функционала

Разработана, теоретически обоснована и апробирована на частных задачах технология вычисления с повышенной точностью отдельных функционалов (параметров) решения уравнений Навье-Стокса с помощью сопряженных дифференциальных уравнений. Технологическая цепочка состоит из нескольких этапов:

- решение исходной системы уравнений Навье-Стокса специальной комбинацией полу-лагранжевой аппроксимации по времени и методом конечных элементов по пространству;
- линейризация уравнений Навье-Стокса путем фиксирования коэффициентов на приближенном решении;
- формирование сопряженных уравнений с искомым функционалом в правой части;
- решение системы сопряженных уравнений той же комбинацией полу-лагранжевой аппроксимации по времени и методом конечных элементов по пространству;
- вычисление необходимых функционалов.

В этих направлениях проведены теоретические исследования и получены следующие конкретные выводы и результаты. Для первого этапа рассмотрены методы повышения точности разработанной комбинации полу-лагранжевой аппроксимации по времени и метода конечных элементов по пространству. В методе конечных элементов рассмотрено применение элементов с многочленами более высокой степени, чем линейные и полилинейные. Особенно тщательно исследовалось применение квадратичных и кубических конечных элементов на прямоугольниках в двумерном и трехмерном случаях. Обоснован вывод о бóльшей эффективности эрмитовых элементов в сравнении с лагранжевыми элементами. Преимущество выражается в меньшем количестве неизвестных и сеточных уравнений для эрмитовых элементов при одинаковой точности приближенных решений в конформном методе конечных элементов. В этой связи предложен новый простой критерий сравнения эффективности конечных элементов по числу порождаемых неизвестных и количества уравнений в конформном методе конечных элементов. Предложен новый тип двумерных и трехмерных квадратичных эрмитовых элементов на прямоугольниках. В двумерном случае установлен их повышенный порядок точности на равномерных сетках. Особое внимание уделено конечному элементу на прямоугольнике, обеспечивающему межэлементную непрерывность самого приближенного решения и его первых производных и носящему название элемента Богнера-Фокса-Шмита. Ранее он применялся лишь на областях, составленных из прямоугольников. Поэтому разработаны специальные конечные элементы на треугольниках, дополняющие элемент Богнера-Фокса-Шмита вблизи границы области и обеспечивающие межэлементную непрерывность приближенного решения и его первых производных. Использование этой совокупности обладает несколькими достоинствами. Основное из них – возможность прямого вычисления

невязки приближенного решения, из величины которой видны проблемные участки области как претенденты на сгущение триангуляции для повышения точности.

Для полу-лагранжевой аппроксимации по времени разработан алгоритм предиктор-корректор с предиктором первого порядка аппроксимации по времени и многоуровневым корректором, повышающим порядок точности приближенного решения на каждом уровне. Основная идея алгоритма аналогична методу уточнения разностями высоких порядков, предложенному профессором Е.А. Волковым в 1960-1970-х годах для уравнения Пуассона.

В результате применения второго и третьего этапов получается сопряженная система линейных алгебраических уравнений, аналогичная системе Навье-Стокса, но с противоположным направлением времени. Ввиду свойств этой системы она является устойчивой и на дифференциальном, и на дискретном уровне. Поэтому решение системы сопряженных уравнений той же комбинацией полу-лагранжевой аппроксимации по времени и методом конечных элементов по пространству обеспечивает устойчивый алгоритм с порядком точности, предоставляемым выбранными конечными элементами и применяемым алгоритмом предиктор-корректор.

Для некоторых классов линейных и квадратичных выходных функционалов от приближенного решения метода конечных элементов доказаны теоремы о повышенном порядке точности вычисления этих функционалов, который превышает порядок точности самих приближенных решений. Этот неожиданный результат проявляется для конечных элементов с многочленами степени 2 и выше. Причем чем выше степень используемых многочленов, тем больше разница в порядках точности функционалов и самого приближенного решения (для достаточно гладких решений исходной задачи). Например, проведенные вычислительные эксперименты для некоторых стационарных уравнений математической физики с эрмитовыми кубическими элементами продемонстрировали предсказуемый четвертый порядок точности приближенного решения метода конечных элементов в среднеквадратичной норме и шестой порядок точности некоторых интегральных функционалов этих же приближенных решений. Алгоритмическая удача этого подхода состоит в том, что сопряженная система уравнений и ее приближенное решение используются лишь для теоретического обоснования. Поэтому численная реализация решения сопряженной задачи не требуется и не усложняет алгоритмическую сторону вычислений.

Предложенные подходы и численные методы применялись для уравнений Навье-Стокса для вязкого теплопроводного газа в двумерном случае:

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0,$$

$$\frac{D(\rho u)}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x}(P - \tau_{xx}) - \frac{\partial}{\partial y}\tau_{xy} = 0,$$

$$\frac{D(\rho v)}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x}\tau_{xy} + \frac{\partial}{\partial y}(P - \tau_{yy}) = 0,$$

$$\frac{D(\rho e)}{Dt} + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} = -P \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \Phi.$$

Здесь искомыми функциями являются плотность $\rho(t, \mathbf{x})$, две компоненты $u(t, \mathbf{x})$ и $v(t, \mathbf{x})$ вектора скорости $\mathbf{u} = (u, v)$, внутренняя энергия $e(t, \mathbf{x})$. Давление $P(t, \mathbf{x})$ алгебраически выражается через ρ и e . Для задачи поставлены соответствующие начальные и краевые условия. На рисунке 5 показаны распределения давления и горизонтальной компоненты

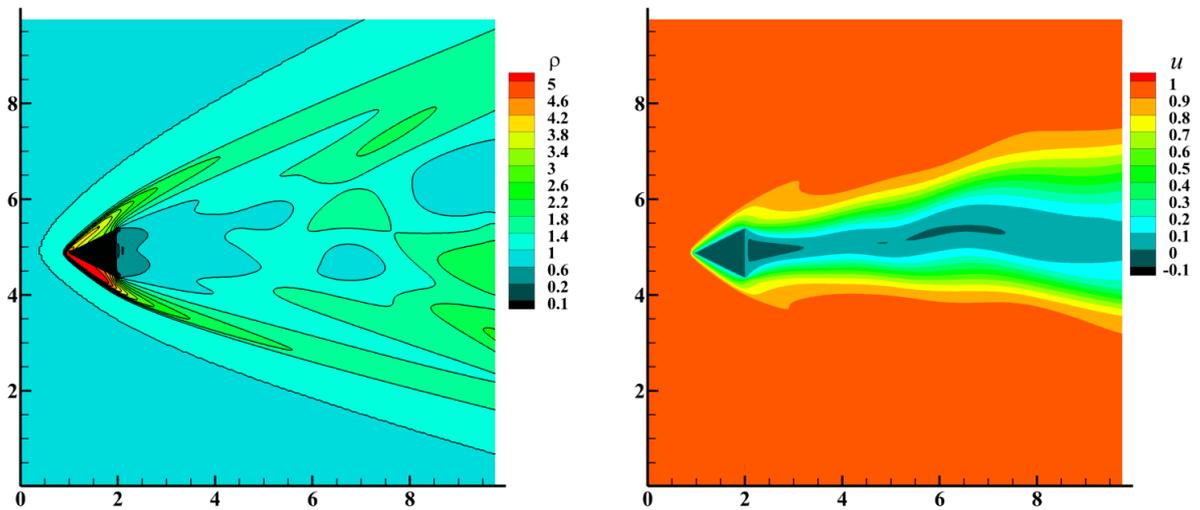


Рисунок 5 – Распределение плотности ρ и горизонтальной скорости v при угле атаки 5° скорости для одного из расчетов обтекания клина сверхзвуковым потоком газа с ненулевым углом атаки.

4 Построение математических моделей «тянущего» бихроматического оптического пучка для резонансных частиц и моделирование долговременной динамики ионов в трехмерной полихроматической оптической сверхрешетке (ДОС)

Целью исследования является обоснование нового чисто оптического (т.е. без использования дополнительных электростатических или магнитостатических полей как в традиционных ионных ловушках) метода удержания сильно взаимодействующих ионов. Метод основан на эффекте выпрямления радиационных сил действующих на резонансные

ионы в полихроматическом световом поле и приводящем к образованию системы глубоких потенциальных ям и значительной по величине силы трения, которые формируют ДОС для ионов.

Математическая модель представляет собой систему стохастических дифференциальных уравнений (ланжевеновского типа) относительно координат и скоростей рассматриваемых ионных частиц. Учитываются четыре вида сил, действующих на каждую частицу в ДОС:

- консервативная выпрямленная градиентная сила;
- диссипативная составляющие выпрямленной градиентной силы – сила трения;
- кулоновская сила, действующая на ион со стороны всех других ионов;
- случайная сила (типа дельта-коррелированного гауссовского случайного процесса), обусловленная квантовыми флуктуациями оптических сил и приводящая к диффузии в пространстве скоростей.

Для вычисления отдельных случайных фазовых траекторий ионов используется алгоритм Штермера-Верле (модифицированный для учёта диссипативных и стохастических сил) и специальный эффективный генератор случайных чисел. Определение математических ожиданий функционалов от решений стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) основывалась на методе Монте-Карло. Программная реализация модели выполнена на языке Fortran-90 и предусматривает параллелизацию вычислений независимых реализаций случайного процесса. Для распараллеливания вычислений использовали DVM-систему, разработанной в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук. Компьютерные расчёты проводились на суперкомпьютере МВС-100К межведомственного суперкомпьютерного центра РАН (г. Москва) для случая двух ионов иттербия 171. Для получения удовлетворительной точности вычисления математических ожиданий число реализаций случайного процесса выбиралось равным $2^{18} = 262144$. При количестве временных шагов $8 \cdot 10^7$ и использовании 256-512 процессоров время счёта варьировалось от 12 до 24 часов. Анализ СДУ (описывающих динамику двух-ионной системы в ДОС) и их численных решений позволил получить следующие результаты.

Показано, что при превышении пространственного периода L некоторого критического значения L_c в ячейке ДОС формируется долгоживущий (с временем жизни превышающем десятки секунд) двух-ионный кулоновский кластер. Величина L_c является нелинейной функцией безразмерных управляющих параметров G и χ , пропорциональных соответственно интенсивностям когерентной и частично когерентной компонент

оптического поля. При этом время жизни кластера оказывается быстрорастущей функцией периода L . Это важное обстоятельство иллюстрирует рисунок 6.

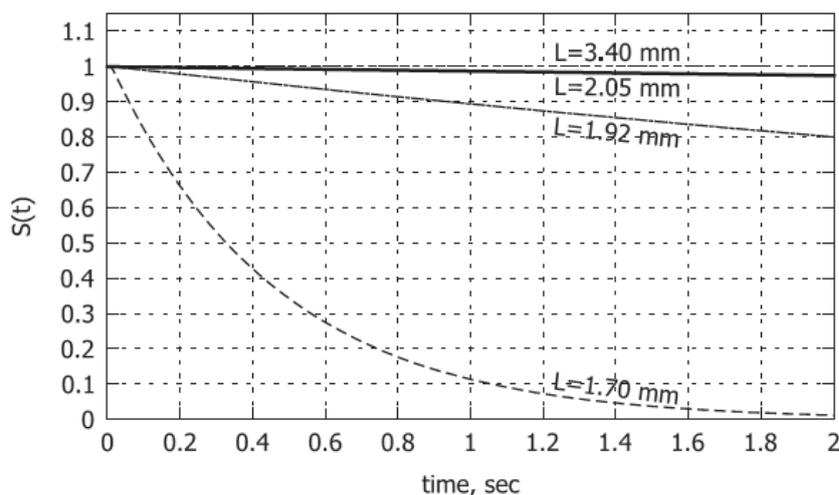


Рисунок 6 – Вероятность выживания $S(t)$ двух-ионного кулоновского кластера в течение времени t . Управляющие параметры $G=0.4$, $\chi=0.2$

Также продемонстрированы специфические особенности исследуемого кулоновского кластера: за время значительно меньшее его времени жизни устанавливается низкая (менее милликельвина) кластерная температура; параметр кулоновского взаимодействия достигает значений порядка 100 при интенсивности оптического излучения не превышающей 1Вт/см; кластер имеет высокую степень ориентации (порядка 0.95) в случае кубоидной ячейки ДОС или совершает хаотические вращательные движения в случае кубической ячейки ДОС.

5 Моделирование взаимодействия резонансных плазмонных нано-кластеров с импульсным лазерным излучением и поглощения-рассеяния излучения в разлетающейся резонансной среде

Разработана модернизированная оптодинамическая модель взаимодействия импульсного лазерного излучения с многочастичными агрегатами сферических металлических наночастиц. Модель учитывает полидисперсность наночастиц и их парные взаимодействия, диссипацию поглощаемой энергии, нагрев и плавление металлического ядра и полимерного адсорбционного слоя, теплообмен между электронной и ионной компонентами металла, а также с межчастичной средой. Впервые учтено температурное изменение константы электронной релаксации материала частиц и влияние этого изменения на взаимодействие наночастиц с лазерным излучением. Детально рассмотрены процессы в простейших резонансных доменах (димерах и тримерах) многочастичных

агрегатов, состоящих из двух или трех частиц произвольного размера. Оптические межчастичные взаимодействия реализуются за счет дипольного взаимодействия частиц, дипольный момент каждой из которых рассчитывается методом связанных диполей (с поправкой на учет вклада высших мультиполей). Установлена роль различных взаимосвязанных факторов, приводящих к фотомодификации резонансных доменов в поле пикосекундных лазерных импульсов.

На основе построенной модели проведены для различных димеров (и тримеров) серии расчетов, позволивших определить изменение характеристик димеров (тримеров) в результате воздействия лазерного излучения пикосекундной длительности с поляризацией, направленной вдоль их оси. На рисунке 7 приведен пример подобных

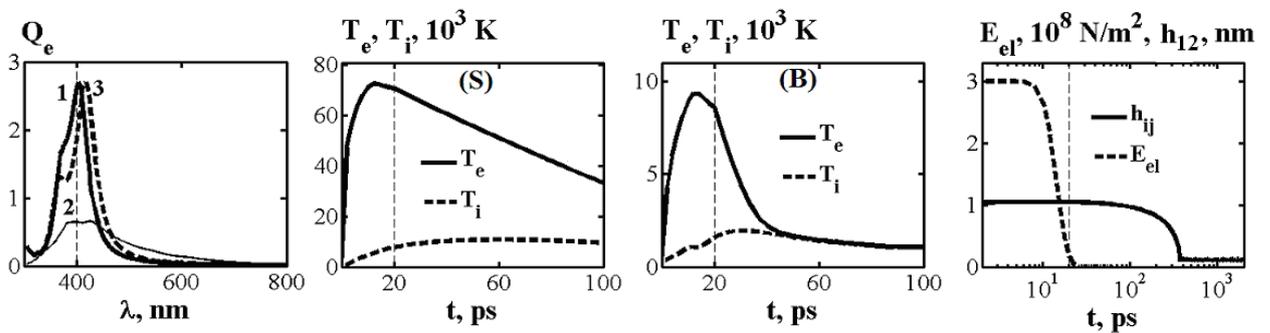


Рисунок 7 – Кинетика параметров полидисперсного димера

расчетов для димера, состоящего из малой частицы (S) радиуса $R_1 = 2$ нм и большой (B) с диаметром $R_2 = 8$ нм и начальным расстоянием между поверхностями частиц $h_{12} = 1$ нм. В проведенных расчетах длина волны лазерного излучения $\lambda = 400$ нм, длительность импульса $\tau_p = 20$ пс, интенсивность $I = 7.5 \cdot 10^8$ Вт/см², $Q_e = \sigma_e / \pi(R_1^2 + R_2^2)$ – эффективность экстинкции: 1 – начальный момент, 2 – на момент окончания импульса ($t = 20$ пс), 3 – $t = 20$ нс. T_e , T_i – температуры электронов проводимости и ионной решетки, E_{el} – модуль упругости адсорбционного (полимерного) слоя (АС) наночастиц.

Для описания изменения спектра введен фактор модификации μ , представляющий собой отношение интегрального изменения спектра к начальному спектру. На основе расчетов получены распределения указанного фактора модификации в зависимости от среднего размера частиц ($\langle R \rangle = (R_1 + R_2) / 2$) и степени полидисперсности ($\Delta R / \langle R \rangle$, $\Delta R = |R_1 - R_2|$) для различных толщин АС. На рисунке 8 отображена зависимость фактора статической (сохраняющейся после лазерного импульса) модификации μ димера от среднего размера частиц $\langle R \rangle$ и степени полидисперсности при различных значениях толщины АС частиц h_i : слева при АС = 1.3 нм, справа при АС = 1.8 нм. Из рисунка 8 следует, что с увеличением степени полидисперсности порог и фактор модификации уменьшаются. В то же время,

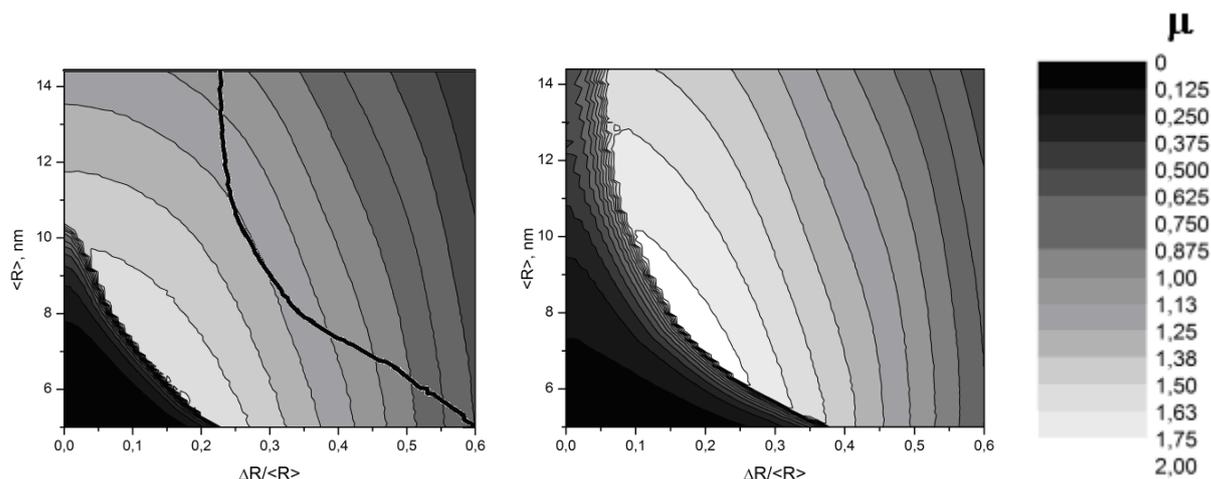


Рисунок 8 – Зависимость фактора статической модификации μ димера

увеличение межчастичного зазора уменьшает область модификации спектра, но увеличивает относительное изменение спектра.

Полученные результаты позволяют предсказывать тенденцию в изменении спектра многочастичных полидисперсных коллоидных агрегатов наночастиц, содержащих резонансные домены в виде димеров.

Рассмотрено поглощение внешнего континуального излучения в автономно расширяющейся сферической газовой среде, имеющей градиент скорости. При наличии разлёта частотная зависимость поглощения излучения, идущего вдоль диаметра, имеет форму полочки, ширина которой $\Delta\omega \approx 2\alpha$, где α определяется отношением скорости разлёта на границе сферы к тепловой скорости атомов. На рисунке 9 изображена

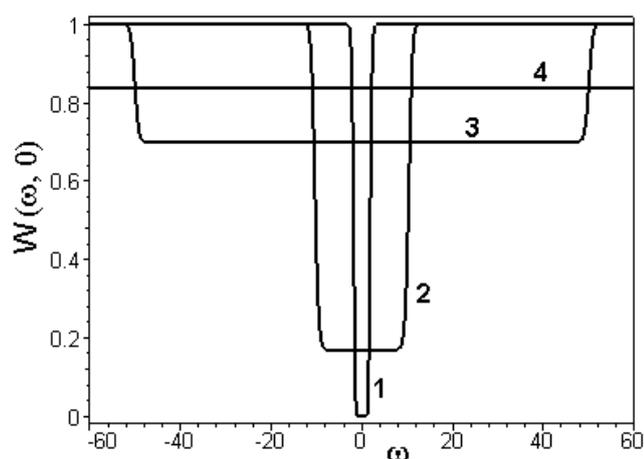


Рисунок 9 – Вероятность выхода излучения $W(\omega, 0)$

вероятность выхода излучения $W(\omega, 0)$. Здесь кривые 1, 2, 3, 4 соответствуют значениям $\alpha = 0; 10; 50; 100$ при $\tau_0 = 10$. Такая форма спектра образуется за счёт того, что в каждой точке среды центр линии поглощения сдвигается по частоте за счёт макроскопического движения газа, вызванного разлётом, а число поглощающих атомов на каждой частоте одинаково. С ростом α поглощение уменьшается и при $\alpha \ll \tau_0$ (τ_0 оптическая толщина среды в отсутствии разлёта) среда становится оптически тонкой. Интегральная по поверхности шара зависимость спектра поглощения сохраняет ширину $\Delta\omega$, однако утрачивает характер полочки, что обязано уменьшению частотной ширины линии поглощения с падением длины хорды. Значение интегральной вероятности поглощения (кривые роста поглощения) возрастает с увеличением α , вызванное ростом ширины линии поглощения $\Delta\omega$. На рисунке 10 изображены кривые

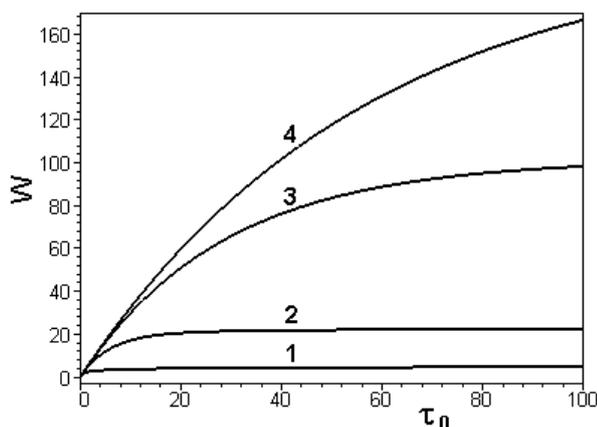


Рисунок 10 – Кривые роста поглощения W

роста поглощения W : кривые 1-4 соответствуют значениям $\alpha = 0; 10; 50; 100$. При $\alpha \ll \tau_0$ поглощение излучения как вдоль хорд, так и интегрально по всей поверхности растёт пропорционально τ_0 , что связано с эффектом уменьшения оптической плотности разлетающейся среды.

В работе также рассмотрен спектр поглощения континуального излучения, выходящего из центра сферы, и кривые роста поглощения для этой ситуации. На рисунке 11 изображена вероятность выхода излучения $W_1(\omega)$. Здесь кривые 1-3 соответствуют параметру $\alpha = 0; 10; 100$ при $\tau_0 = 10$. Спектр поглощения становится асимметричным, так как направление разлёта и распространения излучения имеют одинаковое направление.

Предсказанное явление, связанное с уменьшением оптической плотности среды и увеличением ширины спектра и поглощения континуального излучения в расширяющихся средах, следует учитывать для радиационной кинетики в искусственных образованиях

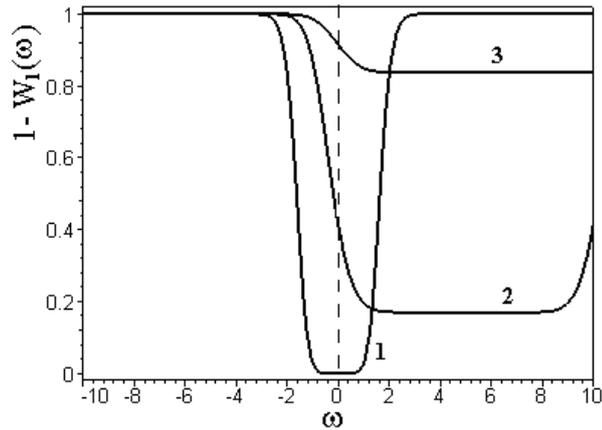


Рисунок 11 – Вероятность выхода излучения $W_1(\omega)$

и планетарных туманностях, для оптической диагностики и лазерного охлаждения в ультрахолодной плазме, а также в других лабораторных и астрофизических расширяющихся средах.

6 Совершенствование технологий производства материалов двигателей летательных аппаратов

Разработаны технологии повышения качества дисков турбонасосного агрегата жидкостного ракетного двигателя (ЖРД). На рисунке 12 слева приведена фотография

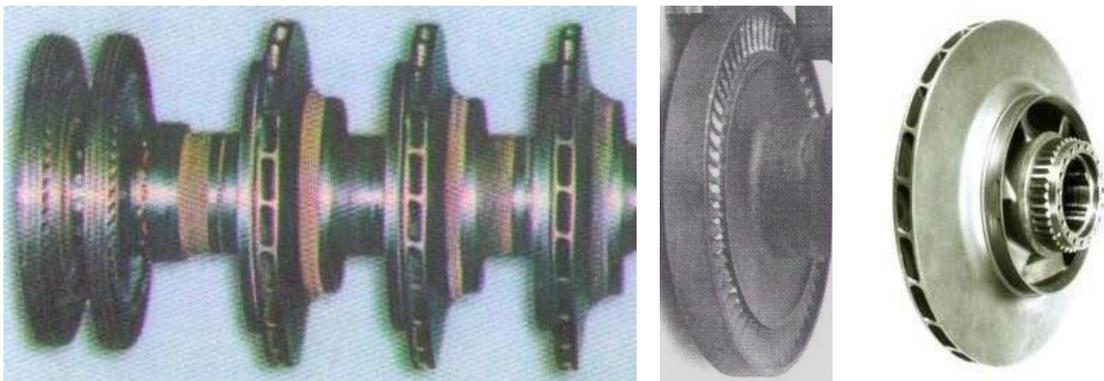


Рисунок 12 – Ротор турбонасосного агрегата ЖРД и его диски

ротора турбонасосного агрегата ЖРД, а посередине и справа изображены диски, устанавливаемые на ротор. На рисунке 13 слева представлен чертеж разработанной литниково-питающей системы (ЛПС), применяемой при изготовлении дисков по выплавляемым моделям из жаропрочного сплава, а справа - отливка диска. В результате применения новой модельной массы и измененной конструкции изготовлены опытные образцы дисков ротора. Разработанная технология обеспечила 100-процентную

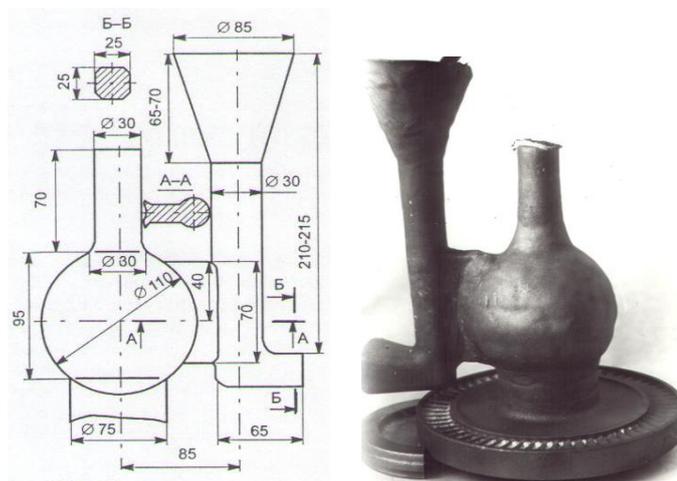


Рисунок 13 – Чертеж разработанной ЛПС и отливка диска

годность деталей по рентгену, и уменьшило в 2.5 - 3 раза отсев на других контрольных операциях при одновременном уменьшении расхода дорогостоящего сплава до 3-х кг на одну отливку.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В течение 2014 года выполнен полный цикл исследований, запланированных по данному проекту. В ходе его выполнения получены результаты, приоритет которых подтверждается рейтинговыми публикациями в ведущих Российских и зарубежных научных журналах.

1. Подтверждена работоспособность виртуальной системы терморегулирования для двухфазных контуров различной конструкции.

2. Посредством численного моделирования процесса прохождения фронтов смены направления межпланетного магнитного поля через переходный слой от ударной волны к магнитопаузе определены следующие параметры: характерное время прохождения фронта от головной ударной волны до границы магнитосферы, время формирования магнитного барьера перед границей магнитосферы при смене направления межпланетного магнитного поля, оценки скорости магнитного пересоединения на границе магнитосферы.

3. Выполнена апробация технологии концентрации вычислений для определения с высокой точностью важных параметров (подъемная сила, сопротивление и др.) решения уравнений Навье-Стокса вязкого сжимаемого газа.

4. Определены условия долговременного чисто оптического удержания ионов в трехмерной полихроматической оптической сверхрешетке.

5. Описаны изменения структуры и оптических свойств малых кластеров плазмонных наночастиц под действием пико- и наносекундных лазерных им-пульсов.

6. Разработан способ повышения характеристик сплавов, применяющихся в производстве двигателей летательных аппаратов.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Основные публикации

1. *Нестеров Д.А., Дмитриев Г.В.* Моделирование колебательных режимов работы контурной тепловой трубы // Материалы 2-й международной конференции "Тепловые трубы для космического применения". Россия, Москва, 15-19 сентября, 2014. – Москва, 2014. – С. 56-59.
2. *N.V. Erkaev, C. J. Farrugia, A. V. Mezentsev, R. B. Torbert, and H. K. Biernat.* Slow mode structure in the nightside magnetosheath related to IMF draping // *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 2014. – Vol. 119, No 2. – P. 1121-1128.
3. *D. I. Kubyshkina, D. A. Sormakov, V. A. Sergeev, V. S. Semenov, N. V. Erkaev, I. V. Kubyshkin, N. Yu. Ganushkina, and S. V. Dubyagin* How to distinguish between kink and sausage modes in flapping oscillations? // *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 2014. – Vol. 119, No 4. – P. 3002-3015.
4. *D. Korovinskiy, A. Divin, V. Ivanova, N. Erkaev, V. Semenov, I. Ivanov, H. Biernat, G. Lapenta, and S. Markidis* MHD Modeling of the Kink “Double-gradient” Branch of the Ballooning Instability in the Magnetotail // *Numerical Modeling of Space Plasma Flows: ASTRONUM-2013 ASP Conference Series*. N. V. Pogorelov, E. Audit, and G. P. Zank, eds., 2014. – Vol. 488 (В печати)
5. *Denisenko V.V.* Electric current penetration from a thunderstorm cloud into the ionosphere at the geomagnetic equator // *Proceedings of the 10-th International Conference "Problems of Geocosmos"*. – St. Petersburg, 2014. – P.82-87.
6. *Шайдуров В.В., Щепановская Г.И., Якубович М.В.* Краевые условия в методе конечных элементов для уравнений Навье-Стокса // *Образовательные ресурсы и технологии*. – 2014. – №1(4). – С. 162–170.
7. *Shchepanovskaya G.I., Shaidurov V.V.* The problem of numerical modeling of flow in expansible channel // *Zbornik radova konferencije MIT 2013*. – Beograd, 2014. – P. 586-594.
8. *Якубович М.В.* Расчет сверхзвуковых течений газа в канале // Материалы XVIII Международной научной конференции, посвященной 90-летию со Дня рождения генерального конструктора ракетно-космических систем академика М.Ф. Решетнева "Решетнёвские чтения". – Красноярск: СибГАУ, 2014. – С. 173-174.
9. *Шайдуров В.В., Щепановская Г.И., Якубович М.В.* Полу-лагранжевый метод и метод конечных элементов в моделировании сверхзвукового обтекания клиновидного профиля // Материалы XVIII Международной научной конференции, посвященной 90-

- летию со Дня рождения генерального конструктора ракетно-космических систем академика М.Ф. Решетнева "Решетнёвские чтения". – Красноярск: СибГАУ, 2014. – С. 162-163.
10. *I.V. Krasnov, L.P. Kamenshchikov*, All-optical trapping of strongly coupled ions // *Optics Communications*, 2014. – Vol. 312. – P. 192-198.
 11. *A.E. Ershov, A.P. Gavrilyuk, S.V. Karpov, P.N. Semina* Optodynamic phenomena in aggregates of polydisperse plasmonic nanoparticles // *Applied Physics B: Lasers and Optics*, 2014, – Vol. 115. – P. 547-560.
 12. *N.Ya. Shaparev* Absorption of continuum radiation in a resonant expanding gaseous sphere // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.*, 2014. – Vol. 47. – P. 225401.
 13. *A.P. Gavrilyuk, N.Ya. Shaparev* The combined effect of optical laser and microwave radiations on a metal surface // *Chinese Physics B*, 2014. – Vol. 23, № 2. – P. 025205.
 14. *A.E. Ershov, A.P. Gavrilyuk, S.V. Karpov, P.N. Semina* Effect of local environment in resonant domains of polydisperse plasmonic nanoparticle aggregates on optodynamic processes in pulsed laser fields // *Chinese Physics B*, 2015. – Vol. 24, №4. – В печати.
 15. *Крушенко Г.Г.* Повышение качества деталей турбонасосного агрегата ЖРД // Ремонт, восстановление, модернизация. – 2014. – № 10. – С. 16-21.
 16. *Крушенко Г.Г., Резанова М.В.* Повышение качества рабочих колес и уменьшение припусков на обработку резанием вала ТНА ЖРД // Тр. VI Общероссийской молодежной науч.-техн. конф. «Молодежь. Техника. Космос:». – СПб: Балт. гос. техн. ун-т, 2014. – С. 119-121.