

Федеральное агентство научных организаций

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ НАУЧНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КРАСНОЯРСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК»

Институт вычислительного моделирования СО РАН – обособленное
подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН

УДК 519.62/.64
№ гос. регистрации 01201356265
Инв. № 0204/2016

УТВЕРЖДАЮ
Директор ФИЦ КНЦ СО РАН

Шабанов В.Ф.

2017 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.

(заключительный)

Номер проекта в ИСГЗ ФАНО 356-2014-0204

Приоритетное направление (номер и наименование) Транспортные и
космические системы

Программа ФНИ (номер и наименование) 36. Системы автоматизации, CALS-
технологии, математические модели и методы исследования сложных
управляющих систем и процессов

Протокол Ученого совета _____
№ ____ от «__» _____ 2017 г.

Руководитель проекта _____ В.В. Шайдунов
член-корреспондент РАН " ____ " _____ 2017 г.

Красноярск, 2017

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель темы
член-корреспондент РАН

(подпись, дата)

В.В. Шайдуров

Исполнители:

зав. отд., д.ф.-м.н.

(подпись, дата)

Н.В. Еркаев

г.н.с., д.т.н.

(подпись, дата)

Г.Г. Крушенко

г.н.с., д.ф.-м.н.

(подпись, дата)

Н.Я. Шапарев

в.н.с., д.ф.-м.н.

(подпись, дата)

А.П. Гаврилюк

в.н.с., д.ф.-м.н.

(подпись, дата)

В.В. Денисенко

в.н.с., д.ф.-м.н.

(подпись, дата)

И.В. Краснов

уч. секр., к.ф.-м.н.

(подпись, дата)

А.В. Вяткин

с.н.с., к.ф.-м.н.

(подпись, дата)

Е.Н. Васильев

с.н.с., к.ф.-м.н.

(подпись, дата)

В.А. Деревянко

с.н.с., к.ф.-м.н.

(подпись, дата)

Г.И. Щепановская

н.с., к.ф.-м.н.

(подпись, дата)

Л.В. Гилева

н.с., к.ф.-м.н.

(подпись, дата)

А.Е. Ершов

н.с., к.ф.-м.н.

(подпись, дата)

И.Л. Исаев

н.с., к.ф.-м.н.

(подпись, дата)

Л.П. Каменщиков

м.н.с., к.ф.-м.н.

(подпись, дата)

В.В. Деревянко

м.н.с.

(подпись, дата)

М.В. Якубович

ведущий инженер	_____	А.В. Макуха
	(подпись, дата)	
старший инженер	_____	С.В. Кукушкин
	(подпись, дата)	
старший инженер	_____	И.В. Тимошина
	(подпись, дата)	
инженер	_____	Д.П. Емельянов
	(подпись, дата)	
инженер	_____	А.А. Пустынский
	(подпись, дата)	
инженер	_____	А.А. Корнеева
	(подпись, дата)	
инженер	_____	В.С. Корниенко
	(подпись, дата)	
инженер	_____	Р.П. Магденко
	(подпись, дата)	
нормоконтролер	_____	А.В. Вяткин
	(подпись, дата)	

РЕФЕРАТ

Отчёт 23 с., 9 рис., 3 прил.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, СИСТЕМЫ ТЕРМОРЕГУЛИРОВАНИЯ КОСМИЧЕСКИХ АППАРАТОВ, МАГНИТОСФЕРА ЗЕМЛИ, УРАВНЕНИЯ НАВЬЕ-СТОКСА ТЕПЛОПРОВОДНОГО ГАЗА, ФОТОМОДИФИКАЦИЯ НАНОЧАСТИЦ

Объектом исследования являются сложные динамические процессы в физических средах, включая ближний космос.

Цель работы – создание и использование новых информационно-математических моделей сложных динамических процессов в физических средах.

Разработана теплофизическая-математическая модель процессов двухфазного тепломассообмена теплоносителя в охлаждаемых миниатюрных керамических платах со встроенными гипертеплопроводящими структурами. Проведенные вычислительные эксперименты продемонстрировали эффективный отвод тепла от электрорадиоэлементов плат с высокой плотностью теплового потока. Эти работы являются составной частью главного результата многолетних работ: проектирование и лабораторные испытания прецизионных систем тепловой стабилизации бортовой космической аппаратуры, работающих с 2012 года на борту космических аппаратов ОАО Информационные спутниковые системы им. академика М.Ф. Решетнева.

Разработана двумерная нестационарная магнитогидродинамическая модель и выполнены численные исследования изгибных «флэппинг» колебаний токового слоя геомагнитного хвоста при наличии нормальной компоненты магнитного поля, возрастающей в направлении к Земле. Рассмотрены низкочастотные волны с волновым вектором, коллинеарным направлению электрического тока в слое.

Создан комплекс алгоритмов для решения двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа. Разработаны и апробированы новые технологии аппроксимации операторов переноса вдоль траекторий с выполнением необходимых законов сохранения в сочетании с конформным методом конечных элементов.

Усовершенствована модель фотомодификации агрегатов наночастиц импульсом лазерного излучения, позволяющая учесть полидисперсность агрегата и изменение оптических свойств наночастиц при их плавлении. Проведены расчеты по фотомодификации димеров. Получены выражения для постоянной затухания Г-плазмонов наночастиц (серебра и золота) в зависимости от температуры и фазового состояния.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	6
1 Разработка теплофизической модели и вычислительных алгоритмов для моделирования системы охлаждения узлов энергопреобразующего комплекса космического аппарата, изготовленных на основе плат из низкотемпературной керамики.....	7
2 Создание новой математической модели колебаний токового слоя магнитосферного хвоста, возбуждаемых движущимися к Земле ускоренными потоками плазмы; получение на ее основе амплитуды и частоты колебаний токового слоя	10
3 Реализация технологической цепочки алгоритмов и их оптимизация на современных компьютерных архитектурах для решения двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа с высокой точностью.....	13
4 Разработка модели взаимодействия импульсного лазерного излучения с резонансными доменами агрегатов плазмонных наночастиц, учитывающей локальное окружение домена, разноразмерность наночастиц и их плавление	15
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	18
ПРИЛОЖЕНИЕ А	20
ПРИЛОЖЕНИЕ Б	22
ПРИЛОЖЕНИЕ В.....	23

ВВЕДЕНИЕ

В соответствии с планом работ исследования проводились по следующим темам.

1. Разработка теплофизической модели и вычислительных алгоритмов для моделирования системы охлаждения узлов энергопреобразующего комплекса космического аппарата, изготовленных на основе плат из низкотемпературной керамики.
2. Создание новой математической модели колебаний токового слоя магнитосферного хвоста, возбуждаемых движущимися к Земле ускоренными потоками плазмы; получение на ее основе амплитуды и частоты колебаний токового слоя.
3. Реализация технологической цепочки алгоритмов и их оптимизация на современных компьютерных архитектурах для решения двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа с высокой точностью.
4. Разработка модели взаимодействия импульсного лазерного излучения с резонансными доменами агрегатов плазмонных наночастиц, учитывающей локальное окружение домена, разноразмерность наночастиц и их плавление.

Настоящий отчет является заключительным по теме: 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 проектировании, автоматизации и управления", по которой были представлены отчеты по этапам 2013, 2014, 2015 годов.

В течение отчетного периода получены следующие результаты, изложенные в последующих разделах.

1 Разработка теплофизической модели и вычислительных алгоритмов для моделирования системы охлаждения узлов энергопреобразующего комплекса космического аппарата, изготовленных на основе плат из низкотемпературной керамики

Охлаждаемая многослойная керамическая плата (ОМКП) представляет собой спеченную керамическую структуру (LTCC-технология) со встроенной системой охлаждения. Внутри керамической платы скомпонована электронная схема – проводники, сопротивления, индуктивности, емкости и т.п. Мощные элементы (транзисторы, микросхемы) устанавливаются на поверхности платы. С нижней, противоположной стороны осуществляется отвод тепла. Для снижения температуры мощных источников тепла внутри керамической платы герметично встраивается плоская капиллярная структура с паровыми каналами, заполненная теплоносителем и обеспечивающая его движение между областями выделения и стока тепла. Эффективная работа ГТП-структуры, как и любой тепловой трубы, возможна при выполнении ряда условий, определяемых свойствами теплоносителя и конструкциями фитиля и паровых каналов. Максимальное количество передаваемого тепла через ГТП-структуру зависит от способности фитиля доставить жидкий теплоноситель от области охлаждения к области нагрева. Капиллярное давление фитиля должно компенсировать сумму перепадов давлений, возникающих в жидкости, движущейся по фитилю, и в паре, движущемуся по паровым каналам. Капиллярное ограничение является ограничивающим фактором максимально передаваемой мощности. В результате максимальная мощность зависит от множества факторов: конструкций фитиля и паровых каналов, свойств теплоносителя, расположения источников тепла, рабочей температуры, ориентации ГТП-структуры в гравитационном поле и т.д.

Для описания переноса тепла в ГТП-структуре используется двумерная стационарная модель. В модели принято, что температуры фаз теплоносителя и пористой структуры в точке (x, y) совпадают и описываются переменной $T(x, y)$. Считается, что теплоноситель находится на линии насыщения, однозначно связывающей давление и температуру пара. В модели используются усредненные характеристики, которые отражают проницаемость внутренней ГТП-структуры для пара и жидкости. Система уравнений имеет вид:

$$\operatorname{div}(-d\lambda\nabla T(x, y)) + g(x, y)T(x, y) + q_{ev}(x, y) = f(x, y), \quad (1)$$

$$\operatorname{div}\left(d_{hp} \frac{\rho_v}{\mu_v} \mathbf{K}_v \nabla P_v\right) = -q_{ev} / H_{ev}, \quad (2)$$

$$\operatorname{div}\left(d_{hp} \frac{\rho_l}{\mu_l} \mathbf{K}_l \nabla P_l\right) = q_{ev} / H_{ev}, \quad (3)$$

где $T(x, y)$ – распределение температуры; $d\lambda$ – произведение толщины и эффективной теплопроводности конструкции тепловой трубы (при отсутствии циркуляции теплоносителя); $g(x, y)$ и $f(x, y)$ – коэффициенты, учитывающие внешние потоки тепла (тепловыделение электрорадиоизделий, сток тепла, слагаемые для радиационных потоков тепла и пр.); $q_{ev}(x, y)$ – тепло, поглощаемое испаряющимся теплоносителем в тепловой трубе (Вт/м^2); $P_l(x, y)$ и $P_v(x, y)$ – давления в жидкостной и паровой фазах теплоносителя; H_{ev} – скрытая теплота парообразования теплоносителя; μ и ρ – вязкость и плотность фаз теплоносителя; K_l , K_v – коэффициенты (в общем случае тензоры), определяющие проницаемость капиллярной структуры тепловой трубы для жидкости и пара.

Для решения системы (1) – (3) дополнительно используется соотношение $\nabla P_v = \frac{\partial P_v}{\partial T_v} \nabla T$, указывающее, что пар внутри тепловой трубы находится на линии насыщения. При этом зависимость производной давления насыщенного пара по температуре может задаваться как отдельная характеристика теплоносителя. Система уравнений (1) – (3) решается итерационно, при этом на каждой итерации после расчета распределения давлений жидкости и пара проверяется следующее условие:

$$P_v(x, y) - P_l(x, y) < P_c, \quad P_c = 2\sigma \cos(\theta) / r_c, \quad (4)$$

где r_c – радиус пор фитиля, σ – коэффициент поверхностного натяжения, θ – предельный угол смачивания материала фитиля теплоносителем. В области, где условие (4) не выполняется, фитиль осушается, и поглощение тепла при испарении прекращается. Для численного решения системы уравнений (1) – (3) вводится двухмерная прямоугольная сетка, функции заменяются сеточными аналогами, обеспечивающими второй порядок аппроксимации дифференциальных операторов. Дополнительно вводится набор более грубых сеток для использования эффективного многосеточного метода решения уравнений. Для точного решения задачи на самой грубой сетке используется метод простой итерации с Чебышевским набором параметров.

Пример использования модели для конфигурации показан на рисунке 1. Источники тепла имеют размеры 8×8 мм. Результаты расчетов проведены для двух одновременно работающих источников тепла «А» и «Б».

На рисунке 2 показано распределение температуры по ГТП-структуре для двух одновременно работающих источников тепла с одинаковой мощностью для $T_x = 20$ °С и $Q = 30$ Вт. Перепад температуры по ГТП структуре составляет примерно 3 градуса.

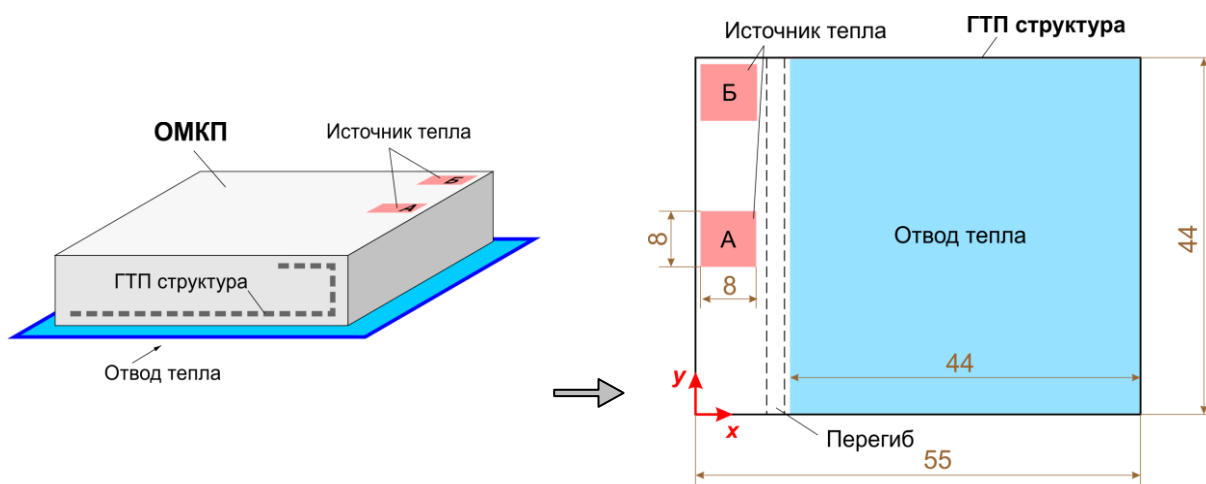


Рисунок 1 – Схема вычислительного эксперимента для ОМКП с локальными нагревателями

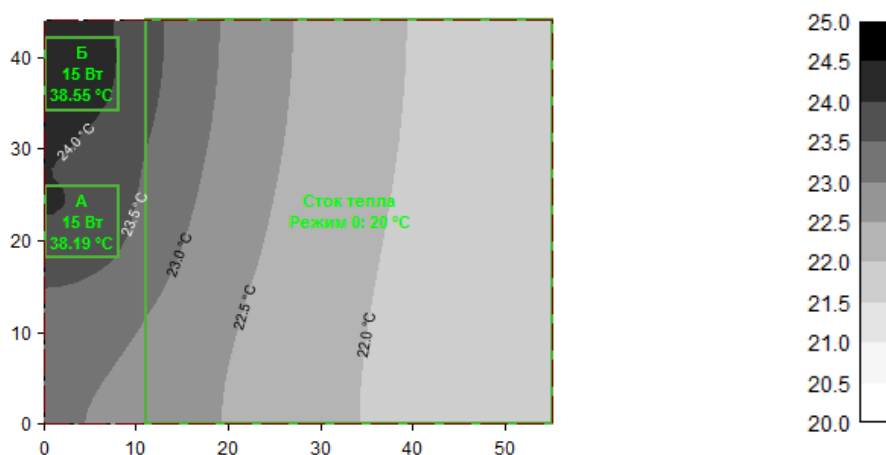


Рисунок 2 – Распределение температуры пара в ГТП-структуре

Таким образом, разработана теплофизическая модель, описывающая процессы переноса тепла в ОМКП со встроенными ГТП-структурами. Модель учитывает процессы двухфазного теплообмена теплоносителя внутри ГТП-структуры и позволяет определить эффективность отвода тепла. На основе математической модели разработаны вычислительные алгоритмы, которые обеспечивают расчет распределения капиллярной нагрузки ГТП-структуры (анализ работоспособности на основе проверки капиллярного ограничения), температурного поля и перепадов температур внутри ОМКП при различных условиях отвода тепла через основание. Проведены вычислительные эксперименты по расчету теплового режима работы образцов. Результаты расчетов показали, что

использование ГТП-структур в ОМКП обеспечивает эффективный отвод тепла от радиоэлементов с высокой плотностью теплового потока.

2 Создание новой математической модели колебаний токового слоя магнитосферного хвоста, возбуждаемых движущимися к Земле ускоренными потоками плазмы; получение на ее основе амплитуды и частоты колебаний токового слоя

Разработана двумерная нестационарная магнитогидродинамическая (МГД) модель и выполнены численные исследования изгибных «флэппинг» колебаний токового слоя геомагнитного хвоста при наличии нормальной компоненты магнитного поля, возрастающей в направлении к Земле. Рассмотрены низкочастотные волны с волновым вектором, коллинеарным направлению электрического тока в слое. Исследование собственных волновых колебаний проводилось методом численного решения начально-граничной задачи для нестационарной двумерной системы МГД уравнений гиперболического типа. В начальный момент времени задавалось локализованное возмущение скорости $V_z = F(x, z) \sin(ky)$, меняющееся по гармоническому закону в направлении распространения волны, на фоне равновесной магнитной конфигурации (рисунок 3), моделирующей слой

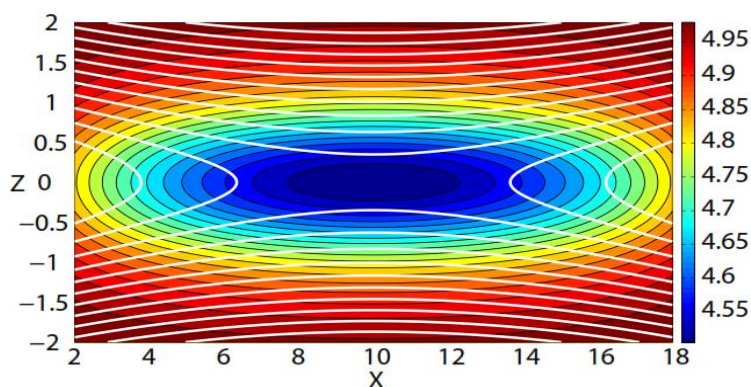


Рисунок 3 – Равновесная конфигурация магнитного поля с токовым слоем. Цветом показано распределение полного давления, равного сумме магнитного и теплового давлений

электрического тока в хвосте магнитосферы Земли. В токовом слое тангенциальная компонента магнитного поля меняет знак, а нормальная компонента монотонно возрастает в направлении к Земле. Как видно на рис. 3, нормальная компонента обращается в нуль при $x = 10$. Координаты нормированы к характерному масштабу порядка 30000 км. Волновое число k является свободным физическим параметром, который принимал различные значения в модельных расчетах.

На границах расчетной области задавались свободные граничные условия. В модельных расчетах «флэппинг» колебания инициировались либо начальным возмущением амплитуды скорости $F(x, z)$ типа Гаусса, либо собственной функцией из упрощенного аналитического решения. Для расчета эволюции волнового возмущения со временем применялась известная численная схема второго порядка Курганова-Тадмора, которая хорошо подходит для моделирования волн благодаря своей малой численной диссипации. Далее для обработки результатов расчета применялся Фурье-анализ: анализировались амплитудно-частотные зависимости, показанные на рисунке 4, на основе которых

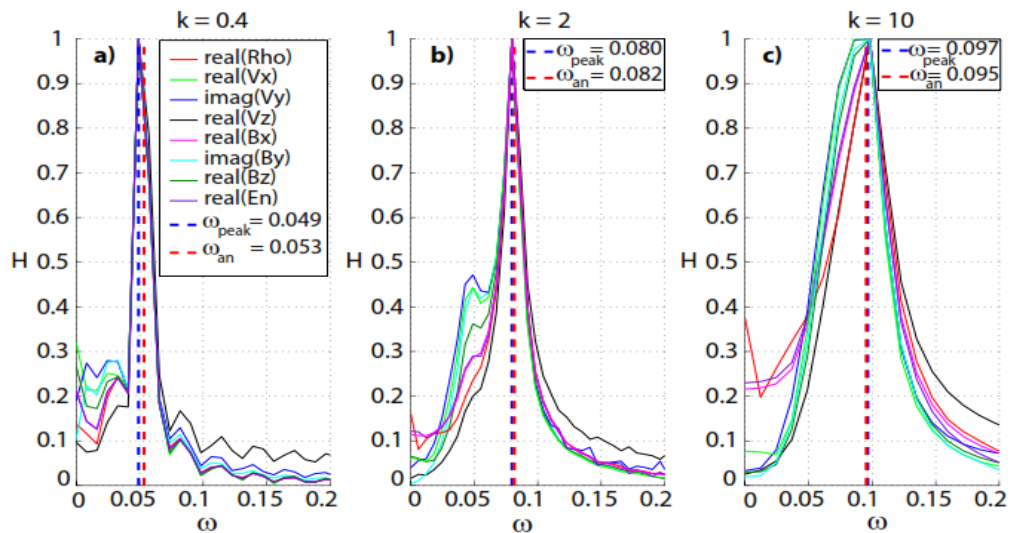


Рисунок 4 – Амплитудно-частотные характеристики для трех значений волнового числа.

Вертикальная голубая штриховая линия соответствует резонансной частоте. Красная штриховая линия обозначает частоту, найденную по приближенной аналитической теории

определялись собственные частоты колебаний. Полученные в результате расчетов собственные функции и дисперсионная кривая сравнивались с аналитическими зависимостями, построенными в рамках упрощенной квазиодномерной модели «двойного градиента». На рисунке 4 видно, что амплитудно-частотные характеристики уширяются с увеличением волнового числа. Это связано с возрастанием численного затухания при больших значениях k . Резонансные частоты обозначены голубыми штриховыми линиями, которые близки к аналитическим значениям, показанным красной штриховой линией.

Расхождение с аналитикой возрастает с уменьшением волнового числа. Проведена большая серия расчетов для различных волновых чисел, на основе которой построена зависимость собственной частоты от волнового числа, называемая дисперсионной зависимостью (рисунке 5). Для каждого значения волнового числа найдены двумерные собственные функции. На рисунке 6 показаны нормальные профили собственной функции,

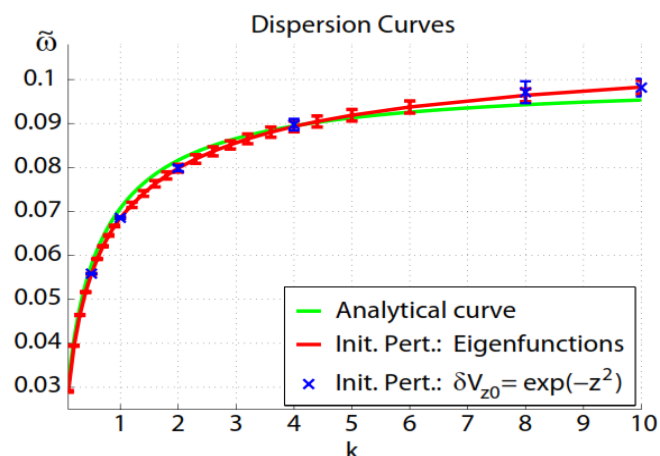


Рисунок 5 – Зависимость частоты от волнового числа. Красная кривая получена численно и соответствует начальному возмущению, равному собственной функции аналитического решения. Голубым цветом показаны точки, соответствующие численному решению при начальном возмущении типа Гаусса. Зеленым цветом показана зависимость, соответствующая приближенной аналитической теории

имеющей смысл нормальной скорости V_z , для различных координат вдоль слоя. При $x = 10$ численная и аналитическая собственные функции наиболее близки друг к другу.

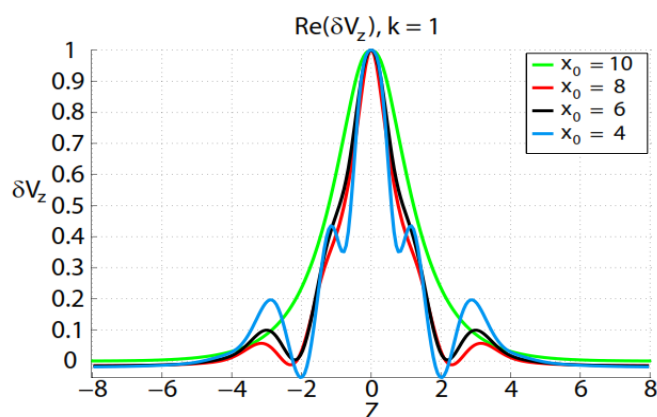


Рисунок 6 – Нормированные профили собственных функций - возмущений скорости, соответствующие волновому числу $k = 1$ для различных координат расстояний вдоль токового слоя

Однако для координат $x < 10$ численная дисперсионная кривая существенно отличается от приближенной аналитической кривой. На основе сравнения приближенного аналитического решения с более общим и обоснованным численным решением полной системы МГД уравнений установлен критерий применимости упрощенной аналитической модели: отношение нормальной компоненты магнитного поля к тангенциальной не должно превышать 0.05.

Изгибные «флэппинг» колебания токового слоя магнитосферного хвоста были неоднократно зарегистрированы спутниками Cluster. Например, 15 октября 2004 г. колебания с периодами 40-60 секунд наблюдались на расстоянии 13 радиусов Земли в хвосте магнитосферы. Эти колебания сопровождались сильными продольными электрическими токами в ионосфере. При этом в ионосфере наземными станциями также регистрировались пульсации, полностью соответствующие продольным токам. Из этого следует вывод, что «флэппинг» колебания токового слоя в хвосте магнитосферы генерируют ионосферные пульсации посредством продольных токов. Наблюдаемые периоды этих пульсаций хорошо согласуются с расчетными значениями, полученными на основе МГД моделирования. Наблюдаемая связь «флэппинг» колебаний с ионосферой диктует необходимость создания адекватной модели ионосферных токов и полей. Моделирование крупномасштабных электрических полей и токов в ионосфере сводится к двумерной модели ионосферного проводника. В нашей работе построена модель глобального ионосферного проводника, в которой применяется подход, основанный на использовании малого параметра, равного отношению Педерсеновской и продольной проводимостей. Если отношение поперечного масштаба рассматриваемого явления к продольному много больше корня из значения указанного малого параметра, то можно пренебречь разностью потенциалов электрического поля вдоль каждой магнитной силовой линии и проинтегрировать Педерсеновскую и Холловскую локальные проводимости вдоль магнитных силовых линий. Вблизи геомагнитного экватора такая двумерная модель пригодна для вертикальных и долготных масштабов, много больших 5 км.

3 Реализация технологической цепочки алгоритмов и их оптимизация на современных компьютерных архитектурах для решения двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа с высокой точностью

Реализована технологическая цепочка алгоритмов и проведена их оптимизация для решения двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа с высокой точностью. Для этого разработаны и апробированы новые приемы аппроксимации операторов переноса вдоль траекторий (лагранжевых производных в разной форме), допускающие выполнение необходимых законов сохранения при переносе элементарных масс объемов газа. В этих алгоритмах на дискретном уровне выполняются законы сохранения массы газа (для уравнения неразрывности) и полной энергии (кинетической + внутренней энергии) для совокупности двух уравнений момента движения и уравнения внутренней энергии. Для остальной части операторов трех последних уравнений

применяется конформный метод конечных элементов. Ввиду динамической адаптации шаблонов аппроксимации созданные алгоритмы свободны от ограничения на шаги по пространству и времени, вытекающего из условия Куранта-Фридрихса-Леви.

В итоге технологическая цепочка включает несколько новых приемов, выгодно отличающих ее от других известных алгоритмов и комплексов программ. Во-первых, математическая модель сформирована в виде системы нестационарных уравнений Навье-Стокса с соответствующими уравнениями состояния газа, в которых неизвестная функция внутренней энергии газа заменена на ее квадратный корень, а лагранжевы производные оператора переноса записаны в специальном виде. Эти замены переводят исследование задачи и ее дискретизацию в гильбертовы пространства, что обеспечивает более широкое привлечение теоретических результатов и более широкий и гибкий выбор способов дискретизации и решения получающихся дискретных задач на каждом слое по времени. Для сверхзвукового истечения газа через вычислительную границу использованы традиционные краевые условия, а для дозвукового истечения разработаны специальные краевые условия. Комбинация этих краевых условий позволяет в ряде случаев существенно уменьшить размер расчетной области по сравнению с другими известными краевыми условиями без потери точности исследуемого потока газа внутри области и без проявления нефизических искажений или отражений в окрестности ее границы.

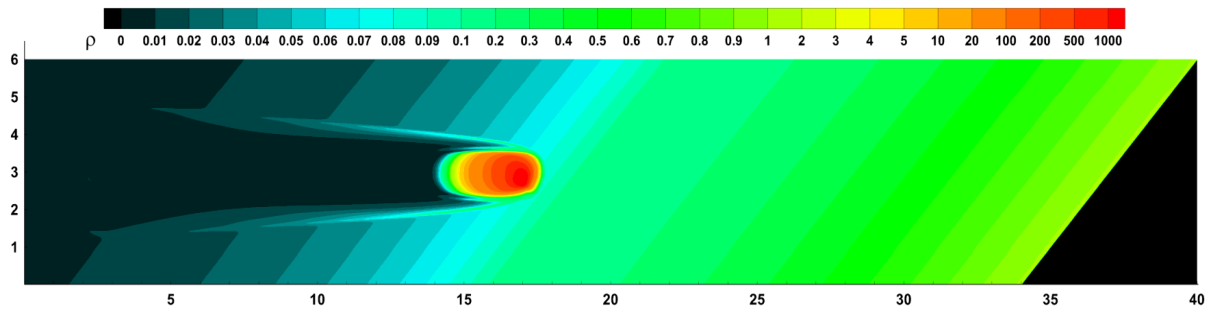
Для гиперболического уравнения неразрывности в дивергентной форме разработан новый эффективный метод решения с перемещением вдоль траекторий и сохранением локальных элементарных масс газа на дискретном уровне, в основу которого положено применение теоремы Гаусса-Остроградского. Для совокупности трех уравнений параболического типа (описывающих моменты движения и корень из внутренней энергии) также разработан новый эффективный способ аппроксимации по времени оператора переноса вдоль траекторий в комбинации с конформным методом конечных элементов для остальной части слагаемых. Обе аппроксимации по времени используют динамические шаблоны, согласованные с локальными перемещениями элементарных объемов газа вдоль траекторий, что снимает ограничение на шаги по пространству и времени, вытекающее из условия Куранта-Фридрихса-Леви.

Строгое совпадение траекторий перемещения элементарных масс газа и их свойств позволило усложнить математическую модель для расчета гиперзвуковых потоков газа с высокэнергетическими проявлениями: электронное возбуждение, декомпозиция и ионизация молекул воздуха.

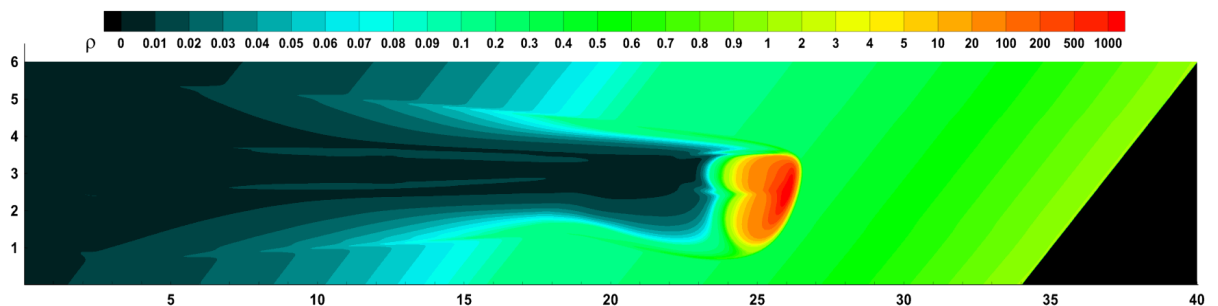
Верификация созданных алгоритмов и программ проводилась для широкого круга соотношений параметров течений газа. На рисунке 7 приведены результаты расчета

плотности воздуха при входе в атмосферу тела со скоростью $M_\infty = 15$ и числом Рейнольдса $Re = 3 \times 10^{11}$.

а) ($t = 15.0$)



б) ($t = 25.0$)



в) ($t = 30.0$)

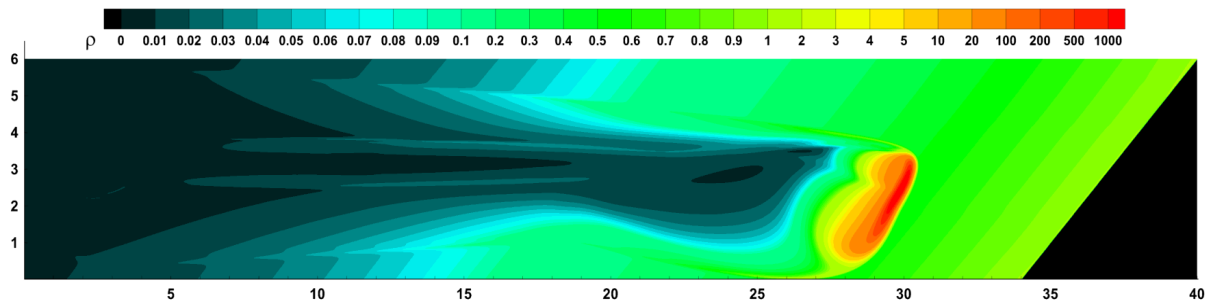


Рисунок 7 – Распределение плотности в различные моменты времени при $M_\infty = 15$, $Re = 3 \times 10^{11}$ при наклонном входе тела в атмосферу с учетом силы тяжести

4 Разработка модели взаимодействия импульсного лазерного излучения с резонансными доменами агрегатов плазмонных наночастиц, учитывающей локальное окружение домена, разноразмерность наночастиц и их плавление

Усовершенствована ранее созданная модель фотомодификации агрегатов наночастиц импульсом лазерного излучения, позволяющая учесть полидисперсность агрегата и

изменение оптических свойств наночастиц при их плавлении. Для описания изменения спектра экстинкции $Q(\lambda)$ агрегата в процессе фотомодификации введен параметр μ , определяющий степень этого изменения:

$$\mu = \left(\int_0^{\infty} |Q(\lambda) - Q_0(\lambda)| d\lambda \right) / \left(\int_0^{\infty} Q_0(\lambda) d\lambda \right).$$

На основе этой модели проведены расчеты по фотомодификации простейшего резонансного домена – димера, состоящего из двух частиц, имеющих средний радиус $\langle R \rangle$ и отличающихся на ΔR . Ниже на рисунке 8 приведены примеры диаграмм, полученных в расчетах, распределения μ в зависимости от размеров частиц и их полидисперсности для различной толщины h полимерного адсорбционного слоя, покрывающего наночастицы и интенсивности лазерного излучения I .

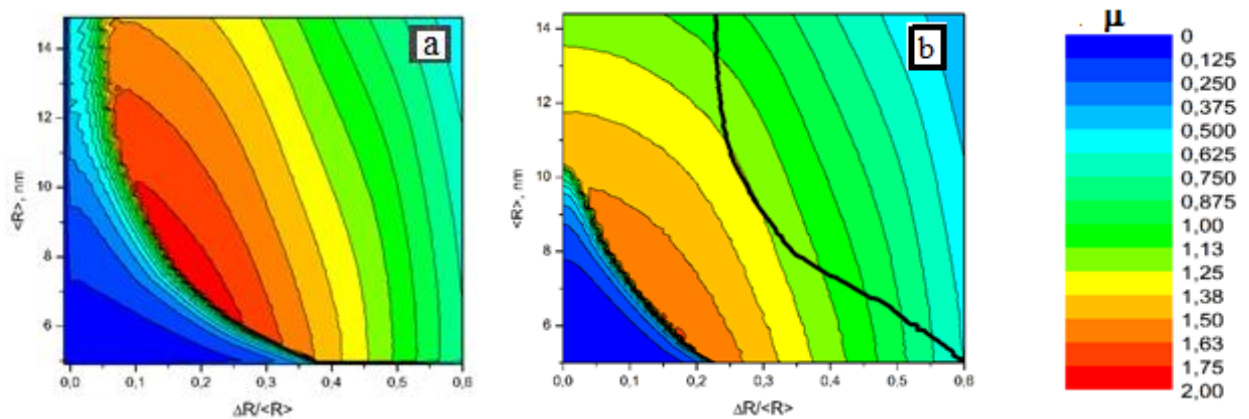


Рисунок 8 – Диаграмма относительного изменения (μ) спектра экстинкции димера наночастиц серебра при его фотомодификации импульсом лазерного излучения длительностью $\tau_p = 20$ пс: а – $h = 1.3$ нм, $I = 1.06 \cdot 10^8$ Вт/см²; б – $h = 1.8$ нм, $I = 4.26 \cdot 10^8$ Вт/см²

Полученные диаграммы позволяют предсказывать (по крайней мере, качественно) степень модификации агрегатов наночастиц в зависимости от его характеристик.

Дальнейшее развитие модели связано с учетом изменения оптических свойств наночастиц в процессе не только их плавления, но и нагрева. Это изменение связано с увеличением постоянной затухания Γ -плазмонов, обусловленной рассеянием электронов на фононах (при плавлении добавляется дополнительный канал рассеяния: на дефектах решетки). С использованием экспериментальных значений оптических характеристик массивных образцов (пленок) и теории электрон-фононного рассеяния в металлах были получены выражения для Γ -наночастиц (серебра и золота) в зависимости от их температуры

и фазового состояния. На основе полученных выражений были проведены расчеты по теории Ми спектров экстинкции изолированных золотых наночастиц (рисунке 9.a) с характерными диаметрами $40\div 60$ нм при различных температурах. На рисунках 9.b и 9.c для сравнения

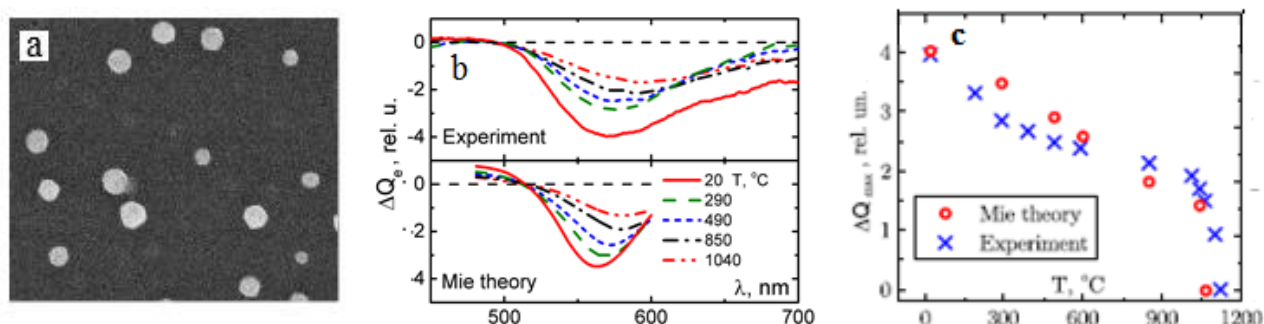


Рисунок 9 – Спектр экстинкции изолированных наночастиц золота в зависимости от их температуры: а – электронная фотография исследуемых наночастиц; б – экспериментальный и теоретический разностный спектр экстинкции ΔQ ; с – изменение максимума ΔQ_{max} разностного спектра при изменении температуры наночастиц.

приведены теоретические и экспериментальные значения относительного изменения спектров экстинкции указанных наночастиц в зависимости от их температуры. Наблюдается хорошее согласие между ними, что подтверждает адекватность полученного описания для Г-наночастиц.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В течение отчетного периода 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.

Разработана теплофизическая-математическая модель, описывающая процессы переноса тепла в охлаждаемых миниатюрных керамических платах (ОМКП) со встроенными гипертеплопроводящими структурами (ГТП-структурами). Модель учитывает процессы двухфазного тепломассообмена теплоносителя внутри ГТП-структуры и позволяет определить эффективность отвода тепла. На основе математической модели разработаны вычислительные алгоритмы по расчету температурного поля и перепадов температур внутри ОМКП при различных условиях отвода тепла через основание. Проведенные вычислительные эксперименты показали, что использование ГТП-структур в ОМКП обеспечивает эффективный отвод тепла от электрорадиоэлементов с высокой плотностью теплового потока.

Разработана двумерная нестационарная магнитогидродинамическая (МГД) модель и выполнены численные исследования изгибных «флэппинг» колебаний токового слоя геомагнитного хвоста при наличии нормальной компоненты магнитного поля, возрастающей в направлении к Земле. Рассмотрены низкочастотные волны с волновым вектором, коллинеарным направлению электрического тока в слое. Исследование собственных волновых колебаний проведено методом численного решения начально-граничной задачи для нестационарной двумерной системы МГД уравнений гиперболического типа.

Реализована технологическая цепочка алгоритмов и проведена их оптимизация для решения двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа с высокой точностью. Для нее разработана и апробирована новая технология аппроксимации оператора переноса вдоль траекторий (лагранжевой производной), допускающая выполнение необходимых законов сохранения при переносе субстанций (для элементарных объемов газа, локальных квадратов скоростей в кинетической энергии и т.д.). Для остальной части операторов уравнений применяется конформный метод конечных элементов. Ввиду динамической адаптации шаблонов аппроксимации созданные алгоритмы свободны от ограничения на шаги по пространству и времени, вытекающего из условия Куранта-Фридрихса-Леви.

Усовершенствована ранее созданная модель фотомодификации агрегатов наночастиц импульсом лазерного излучения, позволяющая учесть полидисперсность агрегата и

изменение оптических свойств наночастиц при их плавлении. На основе новой модели проведены расчеты по фотомодификации простейшего резонансного домена – димера, состоящего из двух частиц разного диаметра. С использованием экспериментальных значений оптических характеристик массивных образцов (пленок) и теории электрон-фононного рассеяния в металлах получены выражения постоянной затухания Γ -плазмонов (серебра и золота) в зависимости от их температуры и фазового состояния.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Основные публикации

1. *Ershov A.E., Gavriluk A.P., Karpov S.V., Polyutov S.P.* Restructuring of plasmonic nanoparticle aggregates with arbitrary particle size distribution in pulsed laser fields // *Chin. Phys. B.* – 2016. – Vol. 25, Iss. 11. – P. 117806.
2. *Gerasimov V.S., Ershov A.E., Gavriluk A.P., Karpov S.V., Ågren H., Polyutov S.P.* Suppression of surface plasmon resonance in Au nanoparticles upon transition to the liquid state // *Optics Express* – 2016. – Vol. 24, Iss. 23. – P. 26851.
3. *Krasnov I.V.* Deep dark all-optical atom trap created by the combination of the cosine-Gauss light beams // *Laser Physics.* – 2015. – Vol. 26, Iss.10. – P.105501.
4. *Shaparev N.Y.* Absorption of laser radiation in ultracold plasma // *Chinese Physics B.* – 2016. – Vol. 25, Iss. 10. – P. 103203.
5. *Shaidurov V., Kornienko V., Vyatkin A.* The mathematical modeling of grouping the dipole water clusters // *AIP Conference Proceedings.* – 2016. – Vol. 1759. – P. 020004-(1-6).
6. *Korneeva A., Shaidurov V.* Computational algorithms for analysis of data from thin-film thermoresistors on a radio-electronic printed circuit board // *AIP Conference Proceedings.* – 2016. – Vol. 1759. – P. 020048-(1-6).
7. *Shaidurov V., Shchepanovskaya G., Yakubovich M.* Mathematical model and numerical algorithm for aerodynamical flow // *AIP Conference Proceedings.* – 2016. – Vol. 1773. – P. 020006-(1-10).
8. *Efremov A., Karepova E., Shaydurov V., Vyatkin A.* Semi-Lagrangian method for advection problem with adaptive grid // *AIP Conference Proceedings.* – 2016. – Vol. 1773. – P. 100003-(1-7).
9. *Gileva L., Karepova E., Shaydurov V.* New Hermite finite elements on rectangles // *AIP Conference Proceedings.* – 2016. – Vol. 1773. – P. 100005-(1-7).
10. *Korovinskiy D.B., Ivanov I.B., Semenov V.S., Erkaev N.V., Kiehas S.A.* Numerical linearized MHD model of flapping oscillations // *Physics of Plasmas.* – 2016. – Vol. 23, No 6. – id.062905.
11. *Dobronets B., Shaydurov V.* Hermitian finite element complementing the Bogner–Fox–Schmit rectangle near curvilinear boundary // *Lobachevskii J. Mathematics.* – 2016. – Vol. 37, Issue 5. – P. 527-533.
12. *Yue H., Liu T., Shaydurov V.* Continuous adjoint-based error estimation and its application to adaptive discontinuous Galerkin method // *Applied Mathematics and Mechanics.* – 2016. – Vol. 37, Issue 11. – P. 1419-1430.

13. *Denisenko V.V. A Global 2-D Model of the Ionospheric Conductor // Atmosphere, ionosphere, safety. Proceedings of V International Conference. Kaliningrad. – 2016. – P. 148-152.*
14. *Yue H., Cheng J., Liu T., Shaydurov V. A hybridizable direct discontinuous Galerkin method for elliptic problems // Boundary Value Problems. – 2016. – Vol. 37, Iss. 11. – P. 1419-1430.*
15. *Вяткин А.В., Кучунова Е.В., Шайдунов В.В. Использование адаптивных сеток при решении двумерного уравнения неразрывности полулагранжевым методом // Сибирские электронные математические известия. – 2016. – Т. 13. – С. 1219-1228.*
16. *Вяткин А.В., Кучунова Е.В. Параллельная реализация полулагранжевого метода для уравнения неразрывности // Образовательные ресурсы и технологии. – 2016. – № 2 (14) – С. 423-429.*
17. *Вяткин А.В., Корниенко В.С. Математическое моделирование взаимодействия ионов с дипольными образованиями // Молодой учёный. – 2016. – № 11 (115). – С. 18-25.*
18. *Вяткин А.В., Кучунова Е.В. Применение полулагранжевого метода для численного решения трехмерного уравнения неразрывности // Решетневские чтения: материалы XX Юбилейной междунар. научн.-практ. конф. – Красноярск: Сиб. гос. аэрокосмич. ун-т. – 2016. – Ч. 2. – С. 122-124.*
19. *Вяткин А.В., Ефремов А.А., Карпова Е.Д., Шайдунов В.В. Полулагранжевый метод для решения уравнения адвекции на адаптивной сетке // Решетневские чтения: материалы XX Юбилейной междунар. научн.-практ. конф. – Красноярск: Сиб. гос. аэрокосмич. ун-т. – 2016. – Ч. 2 – С. 124-126.*
20. *Erkaev N.V., Lammer H., Odert P., Kislyakova K.G., Johnstone C.P., Guedel M., Khodachenko M.L. EUV-driven mass-loss of protoplanetary cores with hydrogen-dominated atmospheres: the influences of ionization and orbital distance // MNRAS. – 2016. – Vol. 460. – P. 1300–1309.*
21. *Kislyakova K.G., Pilat-Lohinger E., Funk B., Lammer H., Fossati L., Eggl S., Schwarz R., Boudjada M.Y., Erkaev N.V. On the ultraviolet anomalies of the WASP-12 and HD 189733 systems: Trojan satellites as a plasma source // MNRAS. – 2016. – Vol. 461. – P. 988-999.*
22. *Lammer H., Erkaev N. V., Fossati L., Juvan I., Odert P., Cubillos P.E., Guenther E., Kislyakova K.G., Johnstone C.P., Luftinger T., Gudel M. Identifying the ‘true’ radius of the hot sub-Neptune CoRoT-24b by mass-loss modeling // MNRAS. – 2016. – Vol. 461. P. 62-66.*
23. *Lichtenegger H.I.M., Kislyakova K.G., Odert P., Erkaev N.V., Lammer H., Groeller H., Johnstone C.P., Elkins-Tanton L., Tu L., Guedel M., Holmstroem M. J. Solar XUV and ENA-driven water loss from early Venus' steam atmosphere // Geophys. Res. – 2016. – V. 121, No 5. – P. 4718-4732.*

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Количество публикации по тематике проекта за весь период выполнения проекта по годам

индикатор	Ед. измерения	Всего за 2013-2016 гг.	2013	2014	2015	2016
Количество публикаций в ведущих российских и международных журналах по результатам исследований, полученных в процессе реализации проекта	единиц	89	20	24	22	23
Количество публикаций в мировых научных журналах, индексируемых в базе данных «Сеть науки» (WEB of Science)	единиц	60	10	13	19	18
Число тезисов в конференциях	единиц	86	19	24	21	22
Число охраняемых объектов интеллектуальной собственности зарегистрированных в России	единиц	5	2	1	1	1

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Выписка из плана научно-исследовательской работы на 2016 год

Содержание работы	Планируемый результат выполнения работы
1. Разработка теплофизической модели и вычислительных алгоритмов для моделирования системы охлаждения узлов энергопреобразующего комплекса космического аппарата, изготовленных на основе плат из низкотемпературной керамики.	1. Теплофизическая модель и вычислительные алгоритмы для моделирования системы охлаждения узлов энергопреобразующего комплекса космического аппарата, изготовленных на основе плат из низкотемпературной керамики.
2. Создание новой математической модели колебаний токового слоя магнитосферного хвоста, возбуждаемых движущимися к Земле ускоренными потоками плазмы; получение на ее основе амплитуды и частоты колебаний токового слоя.	2. Новая математическая модель колебаний токового слоя магнитосферного хвоста, возбуждаемых движущимися к Земле ускоренными потоками плазмы; амплитуды и частоты колебаний токового слоя.
3. Реализация технологической цепочки алгоритмов и их оптимизация на современных компьютерных архитектурах для решения двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа с высокой точностью.	3. Технологическая цепочка оптимизированных алгоритмов на современных компьютерных архитектурах для решения двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа с высокой точностью.
4. Разработка модели взаимодействия импульсного лазерного излучения с резонансными доменами агрегатов плазмонных наночастиц, учитывающей локальное окружение домена, домена, разноразмерность наночастиц и их плавление.	4. Новая модель взаимодействия импульсного лазерного излучения с резонансными доменами агрегатов плазмонных наночастиц, учитывающая локальное окружение домена, разноразмерность наночастиц и их плавление.