

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
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

ГРНТИ 27.41.19

УТВЕРЖДАЮ

№ АААА-А18-118011890024-5

Врио директора ФИЦ КНЦ СО РАН

_____ А.А. Шпедт
«__» _____ 2020 г.

ОТЧЕТ
О ВЫПОЛНЕНИИ ПРОЕКТА
«РАЗРАБОТКА ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ
СЛОЖНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ И ПРОЦЕССОВ В БЛИЖНЕМ
КОСМОСЕ»
(промежуточный)

Номер проекта в плане НИР: 0356-2019-0014

Приоритетное направление: Транспортные и космические системы

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

Протокол Ученого совета _____

№ _____ от «__» _____ 2020 г.

Руководитель проекта
член-корреспондент РАН

_____ В.В. Шайдуров

"__" _____ 2020 г.

Красноярск, 2020

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель темы
член-корреспондент РАН

В.В. Шайдуров

(подпись, дата)

Исполнители:

зам. директора по научной работе ИВМ
СО РАН, к.ф.-м.н.

Д.А. Нестеров

(подпись, дата)

зав. отд., д.ф.-м.н.

Н.В. Еркаев

(подпись, дата)

зав. отд., к.ф.-м.н.

Е.Д. Карепова

(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.

И.И. Рыжков

(подпись, дата)

уч. секр., к.ф.-м.н.

А.В. Вяткин

(подпись, дата)

с.н.с., к.ф.-м.н.

Е.Н. Васильев

(подпись, дата)

с.н.с., к.ф.-м.н.

В.С. Герасимов

(подпись, дата)

с.н.с., к.ф.-м.н.

В.А. Деревянко

(подпись, дата)

н.с., к.ф.-м.н.

Л.В. Гилева

(подпись, дата)

с.н.с., к.ф.-м.н.

А.Е. Ершов

(подпись, дата)

н.с., к.ф.-м.н.

И.Л. Исаев

(подпись, дата)

н.с., к.ф.-м.н.

Л.П. Каменщиков

(подпись, дата)

м.н.с., к.ф.-м.н.

В.В. Деревянко

(подпись, дата)

м.н.с.

С.В. Козлова

(подпись, дата)

| | | |
|-----------------|-----------------|-----------------|
| м.н.с. | _____ | М.В. Якубович |
| | (подпись, дата) | |
| 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. Корнеева |
| | (подпись, дата) | |
| инженер | _____ | В.С. Корниенко |
| | (подпись, дата) | |
| инженер | _____ | А.А. Ефремов |
| | (подпись, дата) | |
| инженер | _____ | А.А. Пустынский |
| | (подпись, дата) | |
| нормоконтролер | _____ | А.В. Вяткин |
| | (подпись, дата) | |

РЕФЕРАТ

Отчёт 51 с., 26 рис., 1 прил.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, СИСТЕМЫ ТЕРМОРЕГУЛИРОВАНИЯ КОСМИЧЕСКИХ АППАРАТОВ, ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ И МАГНИТОСФЕРА ЗЕМЛИ, УРАВНЕНИЯ НАВЬЕ-СТОКСА, МЕМБРАННАЯ ФИЛЬТРАЦИЯ, РЕЗОНАНСНЫЕ ЧАСТИЦЫ

Объектом исследования являются сложные динамические процессы в физических средах, включая ближний космос и работу космических аппаратов в такой среде.

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

В ИВМ СО РАН проводятся работы по созданию и внедрению встроенных интеллектуальных систем мониторинга и контроля тепловых режимов бортового оборудования космических аппаратов. Разработка и использование таких систем является перспективным направлением, которое направлено на повышение качества и надежности сложных устройств. В АО «Информационные спутниковые системы» (г. Железногорск) запланировано применение встроенных интеллектуальных систем контроля тепловых режимов на борту создаваемых космических аппаратов.

В отчете кратко описана вычислительная модель для расчета тепловых режимов блоков бортовой аппаратуры космических аппаратов и метод определения параметров модели по результатам экспериментов для конкретных экземпляров блоков с целью учета их индивидуальных теплофизических характеристик.

Математическая модель и метод определения параметров модели по результатам численных и физических экспериментов сначала отрабатывались на макете блока бортовой аппаратуры, а затем на опытном образце силового модуля системы электропитания космического аппарата. Отклонения расчетных тепловых полей по модели от измеренных значений для этого модуля получились в пределах 1.5 °С.

В дальнейшей работе планируется разработать и опробовать алгоритмы восстановления тепловых полей блока бортовой аппаратуры по показаниям встроенных температурных датчиков. Созданные модели и алгоритмы планируется использовать для анализа поступающих данных от разрабатываемых встроенных систем контроля тепловых режимов бортовой аппаратуры космических аппаратов.

В ходе исследований по разработке физико-математических моделей и численных алгоритмов для расчетов распределений ионосферных электрических полей и токов

рассмотрены два явления: формирование глобальной электрической цепи и проникновение квазистационарного электрического поля от земной поверхности в ионосферу. Построена модель электрического поля, обеспечивающего ионосферное замыкание глобальной электрической цепи, которая генерируется грозами в атмосфере Земли. Построенная модель впервые позволила предсказать создаваемое атмосферными токами распределение электрического поля в ионосфере, тогда как предшественники смогли дать только оценку его напряженности сверху, как оказалось, на порядок завышенную.

Большой практический интерес представляют ионосферные возмущения, наблюдаемые над областями с высокой сейсмической активностью, в связи с надеждой их использования как предвестников землетрясений. В настоящее время наиболее популярные модели рассматривают литосферу как генератор, создающий электрический ток или электрическое поле в атмосфере вблизи поверхности Земли. Основанием для появления таких моделей послужили многочисленные наблюдения возмущений вертикальной компоненты атмосферного электрического поля до и после землетрясений. Но на сегодняшний день известны трехмерные и двумерные модели, в рамках которых показано, что проникающие за счет электропроводности электрические поля практически не могут быть обнаружены спутниковыми измерениями на фоне постоянно существующих ионосферных полей, обусловленных магнитосферными и ионосферными генераторами. В ходе исследований эта точка зрения подтверждена в случае зоны подготовки землетрясения, вытянутой вдоль магнитного меридиана, на который возлагались надежды других авторов по идентификации предвестников землетрясений.

В связи с моделированием неустойчивости токового геомагнитосферного хвоста исследовалась неустойчивость магнитоплазменной конфигурации магнитного хвоста по отношению к поперечным волновым возмущениям на основе численного магнитогидродинамического моделирования. Использовались модели двух типов: линейная размерности 2.5 и нелинейная трехмерная модель. Начальное равновесное состояние задавалось в соответствии с точным решением уравнений Власова-Максвелла для искривленного токового слоя. Расчеты, выполненные с использованием обеих моделей (линейной и нелинейной), показали неустойчивость искривленного токового слоя по отношению к поперечным волновым возмущениям.

Для моделирования трехмерного течения вязкого газа рассмотрена система трехмерных дифференциальных уравнений Навье-Стокса. Построение численного метода осуществлялось лагранжево-эйлеровой аппроксимацией. Транспортные операторы аппроксимировались вдоль траекторий, а эллиптические операторы на каждом временном

слое – методом конечных элементов. В этом случае удается построить дискретную задачу с сохранением полной энергии (кинетической + внутренней энергии газа) на каждом временном слое. В качестве численного примера рассмотрена задача образования тороидальных вихрей при выбросе газа из трубы.

Для исследования устойчивости конвективных течений в экспериментальных установках для разделения жидких смесей использованы уравнения Навье–Стокса для несжимаемой жидкости, дополненные уравнениями переноса тепла и массы. Одним из механизмов развития неустойчивости является аномальная термодиффузия (аномальный эффект Соре), при котором тяжелые компоненты накапливаются в нагретой области, т.е. в верхней части экспериментальной установки, что создает потенциально неустойчивую стратификацию.

При исследовании устойчивости конвективного течения в плоском вертикальном слое в основном состоянии жидкость у нагретой границы поднимается вверх, а вблизи холодной границы опускается вниз под действием силы тяжести. При наличии термодиффузии происходит разделение смеси под действием разности температур в горизонтальном направлении, что вместе с конвективным потоком приводит к разделению смеси в вертикальном направлении. Если в верхней части происходит накопление тяжелой компоненты, то течение может стать неустойчивым. Гидродинамическая неустойчивость может также развиваться благодаря образованию вихрей на границе встречных потоков в центральной части слоя. Выяснен порог наступления неустойчивости в зависимости от числа Грасгофа.

В 2019 году проведена большая серия численных экспериментов на суперкомпьютере для исследования стохастической динамики ансамбля из нескольких десятков резонансных ионов ртути в интерферирующих полихроматических оптических полях. Математическая модель представляет собой систему мультипликативных стохастических дифференциальных уравнений для искомых координат и скоростей ионных частиц. Цель работы состояла в обосновании нового метода чисто оптического пленения и глубокого охлаждения ансамбля ионов. Компьютерное моделирование динамики ионных ансамблей показало, что действие оптической сверхрешетки на ионы может приводить к эффективному тушению кулоновского взрыва и образованию долгоживущих (метастабильных) квазиплоских ионных кулоновских кристаллов с температурой порядка нескольких мК.

Работы 2019 года в области создания математических моделей транспорта ионов в наноструктурах под действием электрического поля посвящены разработке

математической модели ионной проводимости нанопоры с проводящей поверхностью, проведению расчетов и сравнению полученных результатов с экспериментальными данными. Математическое моделирование ионной проводимости осуществляется на основе модели пространственного заряда, которая является объединением двумерных уравнений Навье-Стокса, Нернста-Планка и Пуассона. В ходе работы построена физико-математическая модель ионной проводимости нанопоры с проводящей поверхностью и получено хорошее согласие экспериментальных и расчетных данных. Согласованные расчетные и экспериментальные данные подтверждают гипотезу о нелинейном росте проводимости, обусловленном поляризацией проводящей поверхности поры внешним электрическим полем.

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|-----|
| ВВЕДЕНИЕ | 9 |
| 1. Разработка математических моделей и вычислительных алгоритмов для расчета теплопередачи в радиоэлектронных платах бортовой аппаратуры космических аппаратов для контроля тепловых режимов по показаниям температурных датчиков. | 10 |
| 2. Разработка физико-математических моделей и численных алгоритмов для расчетов распределений ионосферных электрических полей и токов, обусловленных источниками различной физической природы | 255 |
| 3. Разработка численных методов решения уравнений Навье-Стокса для задач аэродинамики с турбулентным режимом путем уточненного учета субсеточных осцилляций. Исследование устойчивости конвективных течений в экспериментальных установках для разделения жидких смесей. | 29 |
| 4. Математическое моделирование стохастической динамики резонансных частиц в когерентных лазерных пучках с учетом выпрямленных градиентных сил. | 37 |
| 5. Создание математических моделей транспорта ионов в наноструктурах под действием электрического поля и сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными | 41 |
| ЗАКЛЮЧЕНИЕ..... | 45 |
| ПРИЛОЖЕНИЕ А | 49 |

ВВЕДЕНИЕ

В соответствии с планом работ исследования проводились по следующим темам.

1. Разработка математических моделей и вычислительных алгоритмов для расчета теплопередачи в радиоэлектронных платах бортовой аппаратуры космических аппаратов для контроля тепловых режимов по показаниям температурных датчиков.
2. Разработка физико-математических моделей и численных алгоритмов для расчетов распределений ионосферных электрических полей и токов, обусловленных источниками различной физической природы.
3. Разработка численных методов решения уравнений Навье-Стокса для задач аэродинамики с турбулентным режимом путем уточненного учета субсеточных осцилляций. Исследование устойчивости конвективных течений в экспериментальных установках для разделения жидких смесей.
4. Математическое моделирование стохастической динамики резонансных частиц в когерентных лазерных пучках с учетом выпрямленных градиентных сил.
5. Создание математических моделей транспорта ионов в наноструктурах под действием электрического поля и сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными.

Настоящий отчет представляет результаты, полученные в 2019 году по теме "Разработка информационно-вычислительных моделей сложных динамических систем и процессов в ближнем космосе".

1 Разработка математических моделей и вычислительных алгоритмов для расчета теплопередачи в радиоэлектронных платах бортовой аппаратуры космических аппаратов для контроля тепловых режимов по показаниям температурных датчиков

1.1 Математическая модель для расчета тепловых режимов блока бортовой аппаратуры

Блок бортовой аппаратуры представляет собой алюминиевую прямоугольную пластину (рамку) с установленными на обеих сторонах двумя платами с радиоэлементами (далее – ЭРИ – электронные радиоизделия), которые требуют отвода тепла (рис. 1). Нижняя часть блока представляет собой плоскую поверхность – «пятку», которая устанавливается на теплоотводящее основание и служит областью отвода тепла.

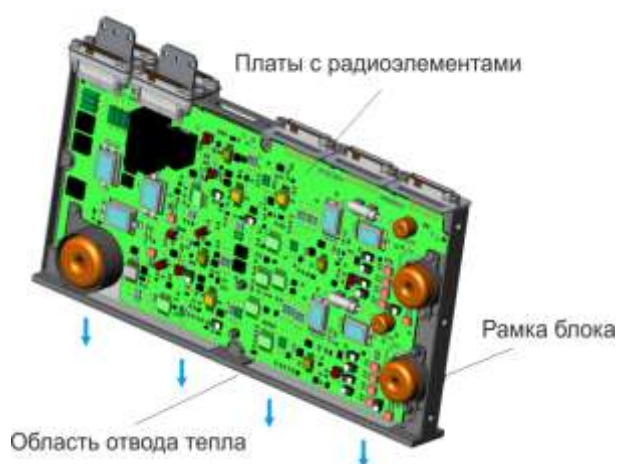


Рисунок 1 – Внешний вид блока бортовой аппаратуры

На обеих сторонах блока располагаются ЭРИ, являющиеся источниками тепла (рис. 2).

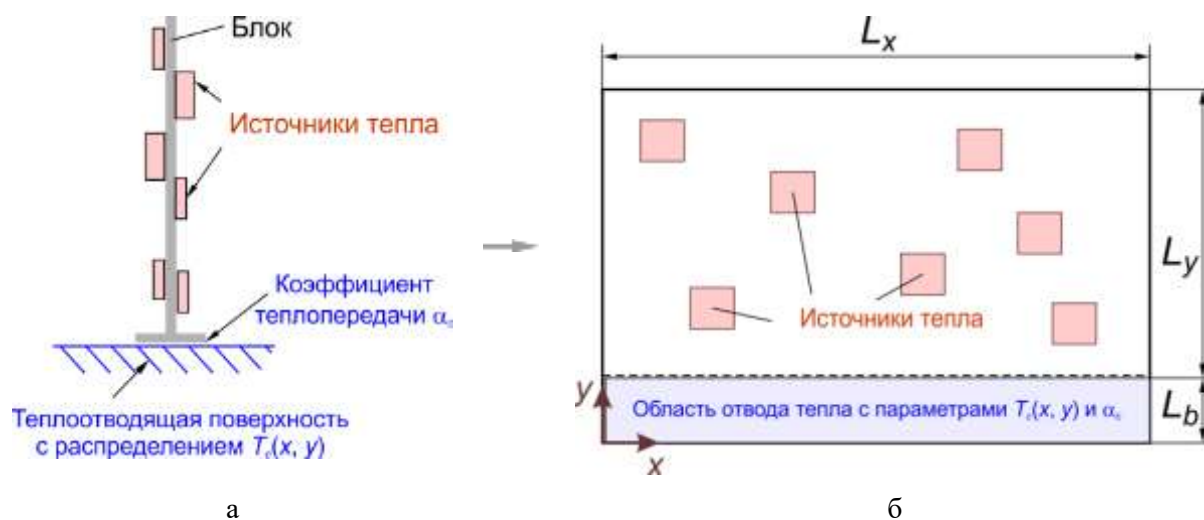


Рисунок 2 – Представление источников и стока тепла на блоке в модели

Распределение температуры описывается двумерным стационарным уравнением теплопроводности с учётом стока тепла:

$$\operatorname{div}(-\gamma(x, y) \cdot \nabla T(x, y)) + \alpha_c \cdot (T(x, y) - T_c(x, y)) = q(x, y), \quad (1.1)$$

где $T(x, y)$ – распределение температуры по поверхности рамки (в градусах); $\gamma(x, y)$ – проводимость рамки, равная произведению теплопроводности на толщину рамки ($\text{м} \cdot \text{Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$); $q(x, y)$ – распределение плотности теплового потока на поверхность рамки без учета потока к области отвода тепла ($\text{Вт}/\text{м}^2$); $T_c(x, y)$ – распределение температуры стока тепла; α_c – коэффициент теплопередачи между теплоотводящей поверхностью и поверхностью рамки ($\text{Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$). Величина α_c отличается от нуля только в области стока тепла.

В качестве граничных условий используются условия второго рода, учитывающие потоки тепла на границах рамки:

$$\gamma \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = q_L(y), \quad \gamma \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=L_x} = q_R(y), \quad \gamma \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=L_y} = q_T(x), \quad (1.2)$$

где функции q_L, q_R, q_T – плотности потоков тепла на единицу длины соответствующей границы ($\text{Вт}/\text{м}$). Необходимо учесть геометрические особенности рамки, которые оказывают заметное влияние на передачу тепла: по периметру рамки имеется кромка, в ее углах находятся утолщения; в нескольких местах имеются отверстия. Они учитываются коэффициентом $\gamma(x, y)$.

Правая часть уравнения (1.1) учитывает потоки тепла с обеих сторон рамки блока «А» и «Б». На каждой поверхности величина потока тепла определяется потоком либо от ЭРИ как источника тепла, либо от окружающей среды в случае открытой поверхности. В последнем случае учитываются потоки от окружающего воздуха (конвективный теплообмен) и радиационные потоки тепла.

Поток за счет излучения описывается формулой

$$q_{rad}(x, y) = \sigma \varepsilon (T^4(x, y) - T_{refl}^4),$$

где ε – коэффициент черноты соответствующей поверхности рамки.

1.2 Вычислительный алгоритм

Для численного решения уравнения (1.1) вводится двумерная прямоугольная равномерная сетка с шагами $h_x = L_x / N_x$, $h_y = L_y / N_y$. Функции $T(x, y)$ и $q(x, y)$ заменяются соответствующими сеточными функциями со значениями в узлах сетки. Значения $\gamma(x, y)$ берутся в «получелых» узлах сетки: $\gamma_{i\pm 1/2, j}$ и $\gamma_{i, j\pm 1/2}$. В итоге соответствующие разностные уравнения для внутренних узлов записываются в виде

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_x^2} \left[\gamma_{i+1/2, j} (T_{i+1, j} - T_{i, j}) - \gamma_{i-1/2, j} (T_{i, j} - T_{i-1, j}) \right] - \\ & \frac{1}{h_y^2} \left[\gamma_{i, j+1/2} (T_{i, j+1} - T_{i, j}) - \gamma_{i, j-1/2} (T_{i, j} - T_{i, j-1}) \right] - g_{i, j} T_{i, j} = -f_{i, j} \end{aligned} \quad (1.3)$$

Для записи разностных уравнений в граничных узлах используется разностная аппроксимация граничных условий (1.2) второго порядка.

Полученные сеточные уравнения представляют собой систему линейных алгебраических уравнений с положительно определенной симметричной матрицей. Для решения системы используется многосеточный итерационный метод. На каждой итерации осуществляется сглаживание невязки методом Зейделя, далее осуществляется укрупнение сетки в два раза с проекцией невязки на новую сетку. На самой крупной сетке уравнение решается довольно точно с использованием метода простой итерации с Чебышевским набором параметров. Далее в процессе возврата на мелкие сетки осуществляется интерполяция решений на разных сетках с дополнительным сглаживанием.

1.3. Экспериментальное определение параметров модели

В описанной вычислительной модели имеется нескольких априори неизвестных параметров: тепловые сопротивления, коэффициенты теплообмена с окружающей средой, коэффициенты черноты и другие характеристики. Причем точность этих значений определяет точность решения модели. Поэтому важно использовать такие параметры, которые наиболее точно отражают индивидуальные теплофизические характеристики конкретного экземпляра блока. Для этого целесообразно определить значения этих параметров по экспериментальным измерениям для конкретных экземпляров блоков.

При производстве и отработке блоков бортовой аппаратуры проводится тепловизионный контроль каждого экземпляра. Для этого собранный блок устанавливается на теплоотводящее основание и включается в различные режимы работы

с известным тепловыделением радиоэлементов. Дополнительно измеряется температура окружающей среды и температура основания. Полученные термограммы используются для проверки тепловых режимов элементов блока. Они могут быть использованы для определения параметров модели конкретного экземпляра блока. То есть математическую модель можно настроить под конкретный экземпляр блока по результатам тепловизионного контроля, который будет осуществляться по результатам измерений температур в нескольких точках, проводимых встроенными или дополнительными датчиками, а также с помощью термограмм поверхностей блока.

В итоге метод настройки математической модели связан с решением следующей задачи многомерной оптимизации. Пусть имеется стационарная математическая модель M , позволяющая рассчитать тепловое поле блока $T(P)$, с набором настраиваемых параметров $\mathbf{q} = (Q_1, Q_2, \dots, Q_N)$. Тепловое поле $T(P)$ – это множество температур, которые определяются по модели. Для модели, описанной в разделе 0.1, определяются двумерные температурные поля поверхностей блока $T(x, y)$ и температуры радиоэлементов.

В качестве параметров могут выступать непрерывные величины, влияющие на тепловое поле $T(P)$, задаваемые значениями в конечном наборе узлов с возможностью междуузловой интерполяции. Это могут быть тепловые сопротивления, теплофизические характеристики материалов, температура окружающего воздуха, потоки тепла от окружающей среды и другие данные. Параметры модели Q_i принимают значения из некоторого диапазона, то есть имеются ограничения на нижнюю и верхнюю границы Q_{\min_i} и Q_{\max_i} , которые определяются из физических соображений.

В ходе экспериментов измеряются температуры в нескольких точках, представленные вектором: $\mathbf{s}_m = (T_{m,1}, T_{m,2}, \dots, T_{m,N})$. А рассчитанные значения температур по математической модели в этих же точках представлены вектором $\mathbf{s}_c = T(P_j) = (T_{c,1}, T_{c,2}, \dots, T_{c,N})$.

Задача состоит в определении таких значений параметров \mathbf{q} , при которых вектор рассчитанных значений температур \mathbf{s}_c наиболее близок к измеренным значениям \mathbf{s}_m . В качестве целевой минимизируемой функции взята сумма квадратов отклонений рассчитанной температуры от измеренной температуры:

$$F(\mathbf{q}) = \sum_j (T_{c,j} - T_{m,j})^2. \quad (1.4)$$

Важно отметить, что обычно проводится множество измерений температур для нескольких разных режимов работы блока и разных значений температур

теплоотводящего основания. При этом необходимо минимизировать отклонения в каждой точке по всем измерениям одновременно. В этом случае целесообразно включить в одну целевую функцию отклонения по всем точкам и по всем измерениям:

$$F(\mathbf{q}) = \sum_n \sum_j (T_{c,j}^{(n)} - T_{m,j}^{(n)})^2, \quad (1.5)$$

где n – номер эксперимента.

Для решения задачи оптимизации используется следующий итерационный процесс. Пусть в модели M заданы начальные значения параметров \mathbf{q}_0 и ограничения \mathbf{q}_{\min} и \mathbf{q}_{\max} , а также измеренные значения температур s_m .

1. Задается номер итерации $k = 0$ и вектор значений параметров $\mathbf{q}_k = \mathbf{q}_0$.
2. Проводится расчет вектора s_k .
3. Вычисляется целевая функция $F_k(s_k)$.
4. Если целевая функция достаточно мала, то решение найдено: $T_k(P)$.
6. Иначе: вычисляем \mathbf{q}_{k+1} , увеличиваем номер итерации $k = k + 1$ и повторяем вычисления с шага 2.

Способ корректировки значения \mathbf{q} при итерациях определяется используемым методом многомерной оптимизации. В случае использования целевой функции вида (5) эффективным является алгоритм Левенберга – Марквардта (Levenberg – Marquardt algorithm). Данный метод на каждой итерации требует вычисления Якобиана:

$$J_{i,j} = \frac{\partial T_j}{\partial Q_i}. \quad (1.6)$$

Расчет Якобиана или его аппроксимаций требует решения теплофизической задачи $N_i + 1$ раз. Это может быть в вычислительном плане затратной операцией. В этом случае используется метод секущих (secant updates) для использования приближений Якобиана на некоторых итерациях вместо его численного расчета. В качестве начального значения параметров выбирается $\mathbf{q}_0 = \mathbf{q}_{\min} + \mathbf{q}_{\max} / 2$.

1.4 Использование модели для макета блока бортовой аппаратуры

Описанные в предыдущих разделах математическая теплофизическая модель и метод определения ее параметров опробованы на макете блока бортовой аппаратуры. Макет создан в ИВМ СО РАН для разработки, проверки и исследования математических

моделей и вычислительных алгоритмов для контроля тепловых режимов по показаниям встроенных температурных датчиков. Он позволяет имитировать тепловые процессы, происходящие в блоках бортовой аппаратуры в разных режимах работы и при разных внешних условиях. Работа с макетом осуществляется на специально созданном стенде, оснащённом теплоотводящим основанием и автоматизированной системой измерения. В ходе экспериментов с макетом в режиме реального времени измеряются температуры встроенными датчиками и тепловые поля с помощью тепловизора.

Макет блока бортовой аппаратуры имеет конструкцию, близкую к конструкции реальных модулей, входящих в состав бортового оборудования космических аппаратов. Он представляет собой алюминиевую рамку с наклеенной текстолитовой платой. Схема выделения и отвода тепла на макете аналогична схеме тепловых процессов на реальных блоках. На плате установлены нагреватели – мощные транзисторы, которые имитируют работу реальных радиоэлементов на силовом модуле. Нижняя часть рамки («пятка») прижимается к теплоотводящей поверхности. Схема размещения элементов на макете показана на рис. 3.

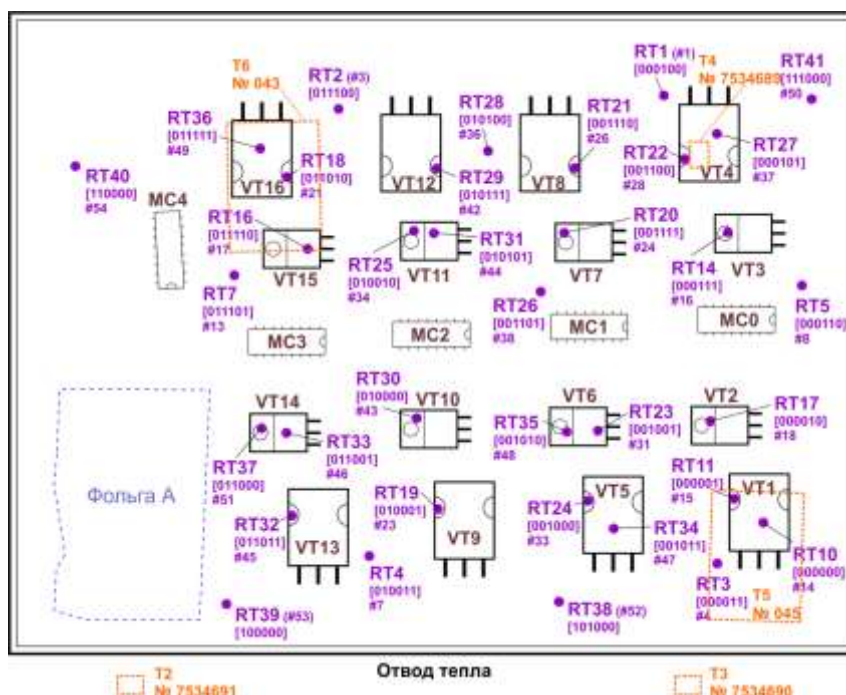


Рисунок 3 – Схема размещения элементов на макете

Система измерения температур на макете представляет собой 34 датчика – термисторы RT1, RT2, ... и коммутаторы. На транзисторах датчики установлены двумя способами: на корпус транзистора и на основание-радиатор. Два разных способа были использованы для выбора оптимального варианта в дальнейшем.

Для экспериментов с макетом было создано специальное рабочее место, представляющее собой вакуумную камеру с теплоотводящим основанием (рис. 4).

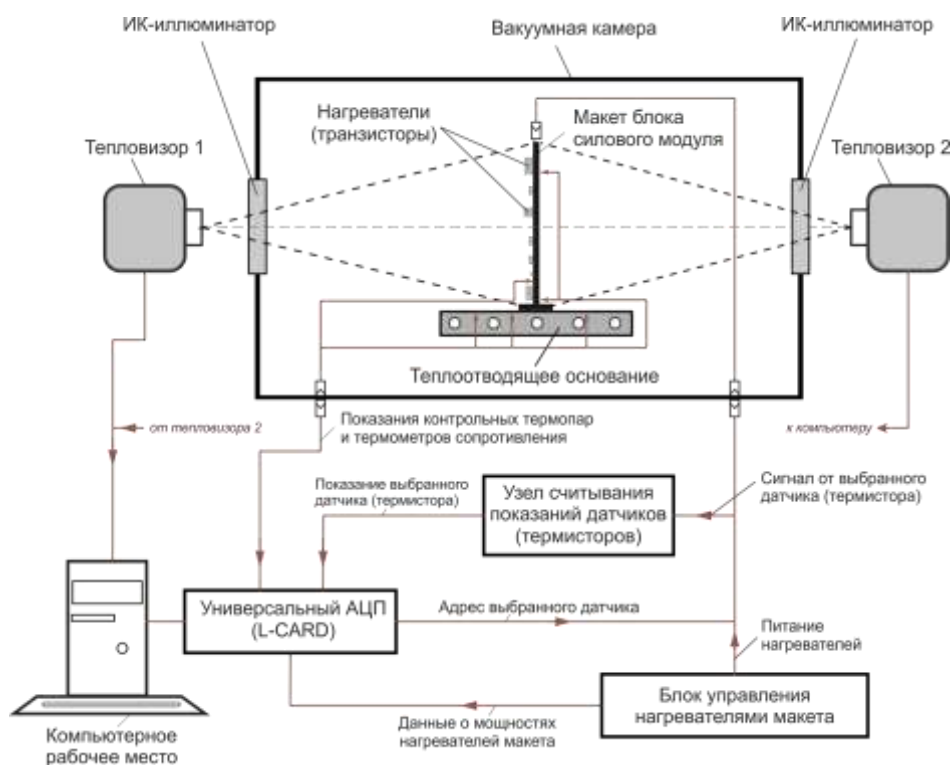


Рисунок. 4 – Рабочее место для экспериментов с макетом блока бортовой аппаратуры

Рабочее место обеспечивало имитацию различных условий работы макета (вакуум, атмосфера). Температура теплоотводящего основания могла задаваться и поддерживаться диапазоне от -40 до $+80^{\circ}\text{C}$. Рабочее место оснащено системой управления нагревателями макета, позволяющей в автоматическом режиме задавать требуемые мощности тепловыделения транзисторов. Для опроса встроенных температурных датчиков (термисторов) и измерения температур дополнительными датчиками использовалась универсальная система сбора и оцифровки данных L-CARD. Вакуумная камера оснащена инфракрасными иллюминаторами и тепловизорами для контроля тепловых полей поверхностей макета блока (рис. 5).

Модель опробована на множестве экспериментальных данных, полученных при работе с макетом блока (200 экспериментов). Определение оптимальных значений параметров модели проведено по описанному алгоритму в три этапа.

На первом этапе оптимизировались значения следующих параметров модели:

1. Коэффициент черноты поверхностей $\varepsilon = 0,95$;
2. Тепловое сопротивление между рамкой и теплоотводящим основанием $R_c = 3,4 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2 \cdot \text{К}/\text{Вт}$;



Рисунок 5 – Внешний вид рабочего места для экспериментов с макетов блока

3. Эффективная проводимость материала рамки (вне области отверстий и утолщений), равная $\lambda d = 0,129 \text{ м}\cdot\text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$. Для толщины $d = 1,1 \text{ мм}$ значение теплопроводности соответствует $\lambda = 117 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$;
4. Тепловая проводимость кромки рамки по периметру $\lambda_{\text{в}} = 1,67 \text{ м}\cdot\text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$.

Поиск оптимальных значений перечисленных параметров осуществлялся по экспериментам, проведенным в вакууме для исключения влияния параметров атмосферы.

На втором этапе рассчитаны тепловые сопротивления между ЭРИ и посадочными местами (без учета теплового сопротивления платы). Получены значения для двух видов ЭРИ: $R_1 = 0,61 \text{ }^\circ\text{C}/\text{Вт}$ и $R_2 = 0,30 \text{ }^\circ\text{C}/\text{Вт}$.

На третьем этапе рассчитаны оптимальные значения коэффициентов теплообмена между поверхностью макета и окружающим воздухом для влияния атмосферных условий $\alpha = 4,8 \text{ Вт}/(\text{м}^2\cdot\text{К})$. Оптимизация проводилась по экспериментам в условиях атмосферы.

Более полную картину соответствия результатов моделирования экспериментам показывает рис. 6. На рисунке сравниваются результаты по большому количеству экспериментов (125 шт.) для средних значений температур на стороне «Б» макета. Учтены эксперименты для разных вариантов тепловыделения ЭРИ (около 10 вариантов) при разных температурах теплоотводящей поверхности: $-1.0 \text{ }^\circ\text{C}$, $+10 \text{ }^\circ\text{C}$, $+25 \text{ }^\circ\text{C}$, $+40 \text{ }^\circ\text{C}$ и $+60 \text{ }^\circ\text{C}$.

На рис. 6 ось x соответствует рассчитанным значениям, а ось y – экспериментальным измерениям. Разброс отклонений расчетных значений от измеренных величин ($T_{\text{расч}}$ –

$T_{\text{эсп}}$) по всему массиву экспериментов составляет ± 2.5 градуса (оценка по двум стандартным отклонениям 2σ).

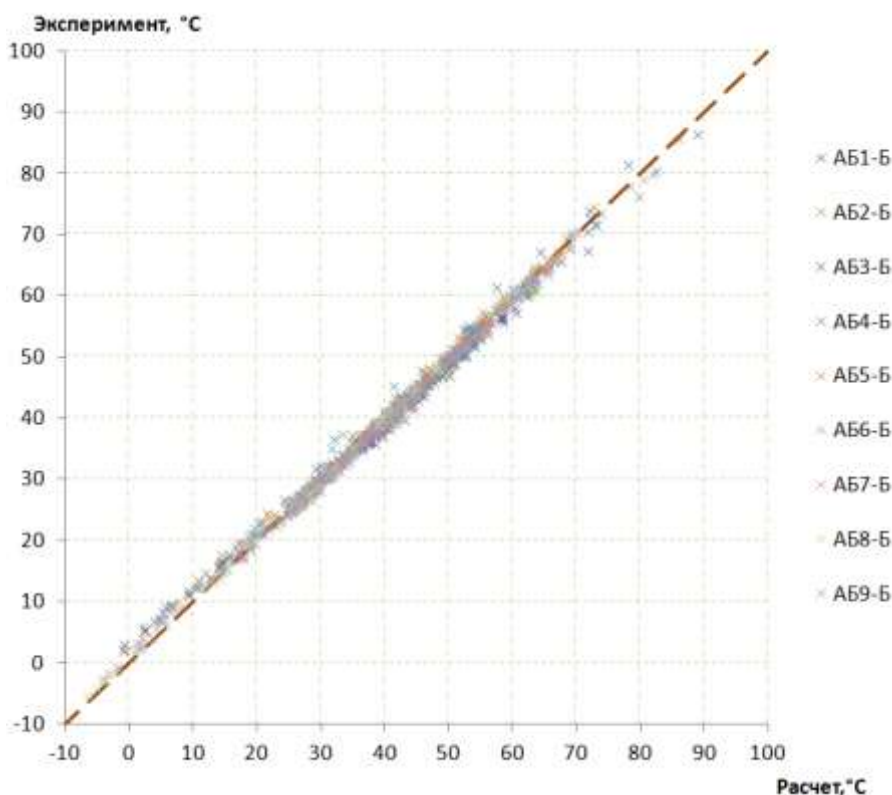


Рисунок 6 – Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными для тестового макета

В АО «Информационные спутниковые системы» разработан опытный образец силового модуля системы электропитания космического аппарата. Модуль предназначен для отработки схемных решений. В модуле встроены температурные датчики для отработки решений по созданию системы контроля тепловых режимов.

Силовой модуль представляет собой алюминиевую рамку с несколькими платами, на которых установлено множество радиоэлементов. В составе модуля на платах и на радиоэлементах установлены температурные датчики (термисторы) и система опроса датчиков. Опрос датчиков проводился с использованием схем и программного обеспечения, отработанного на макете блока бортовой аппаратуры.

Для корректировки теплофизической модели были использованы результаты измерений, которые проводились в цехе при отработке и испытаниях модуля. Измерения проводились для нескольких режимов работы силового модуля, соответствующие разным уровням тепловыделения радиоэлементов. В ходе измерений модуль включался в один из режимов работы. Рамка модуля была установлена на основание, оснащенное устройством охлаждения. Показания датчиков записывались постоянно в ходе измерений с

периодичностью 12 секунд с помощью специального программного обеспечения. При достижении стационарных состояний производилась съемка термограмм.

Пример записанных показаний встроенных температурных датчиков в ходе тепловых испытаний модуля (термоциклирование) показан на рис. 7 (дополнительно показаны значения температур, рассчитанные по встроенным в схему эталонным сопротивлениям термисторов R17-R19 с заданными номиналами 1, 10 и 100 кОм). Вертикальными пунктирными линиями показаны моменты времени, соответствующие событиям изменения режима работы или установления стационарного состояния. В начальный момент времени происходило охлаждение модуля до $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$. Далее в момент времени 3 силовая часть была включена и к моменту времени 4 достигнуто стационарное состояние. Далее модуль был выключен и температура основания увеличена до $+55\text{ }^{\circ}\text{C}$. В момент времени 7 силовая часть снова была включена.

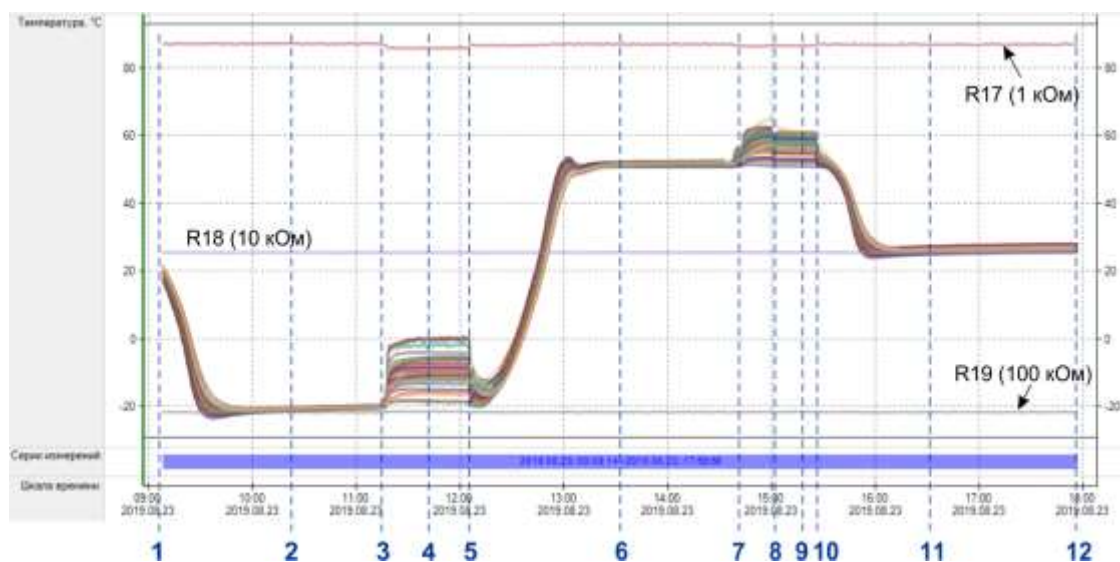


Рисунок 7 – Показания встроенных датчиков в ходе испытаний

На рис. 8 показан пример термограммы, полученной в момент работы силовой части модуля.

Важной особенностью являлось отсутствие информации о точных значениях мощностей тепловыделения ЭРИ, которые изменялись от замера к замеру (были разными для каждого режима работы модуля). Для преодоления этой трудности в основном цикле оптимизации запускалась вторичная процедура оптимизации в рамках отдельного замера для поиска мощностей ЭРИ и температуры теплоотводящего основания для текущего замера при текущих значениях характеристик основного цикла.

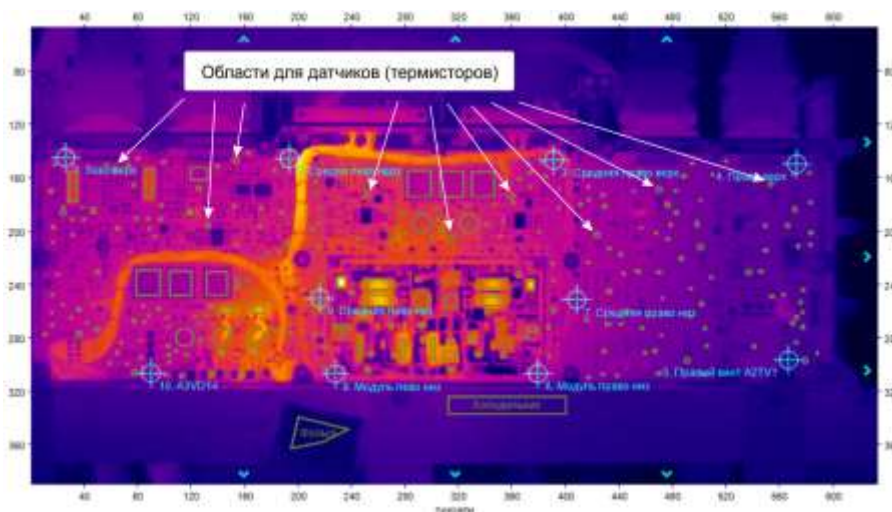


Рисунок 8 – Поверхность анализа на основе эталонной термограммы

Дополнительно в ходе оптимизации была использована информация о том, что некоторые ЭРИ одного вида имеют одинаковое тепловое сопротивление. Это позволило сократить количество оптимизируемых параметров. Общее количество параметров в ходе оптимизации составляло 55 шт.

В результате проведенных вычислительных процедур оптимизации были определены значения теплофизических характеристик для модели. На рис. 9 показаны отклонения расчетных значений, полученных по скорректированной модели, от измеренных температур по областям на термограмме. На рис. 10 показаны отклонения по всем областям по всем измерениям. Можно видеть, что отклонения лежат в пределах 1.5 °С.

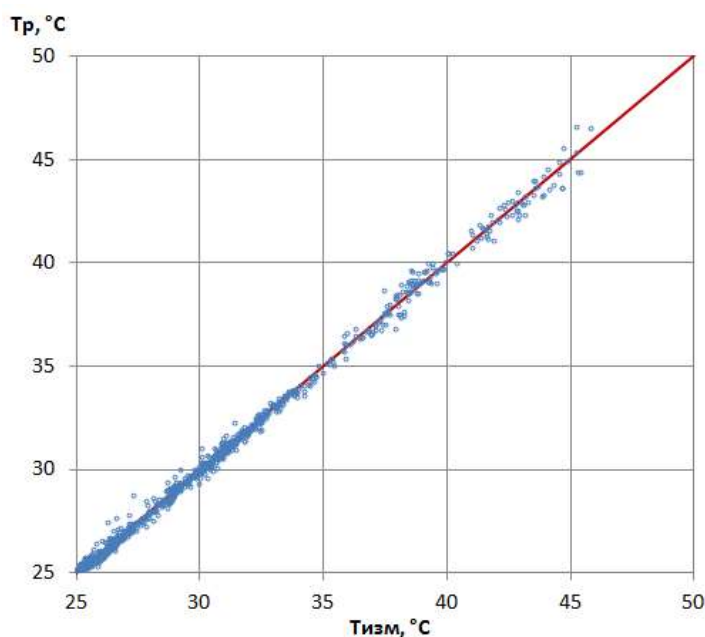


Рисунок 9 – Сравнение расчетных температур с термограммами для силового блока



Рисунок 10 – Отклонение расчетных температур от термограмм силового блока

Созданные модели и алгоритмы планируется использовать для анализа поступающих данных от разрабатываемых встроенных систем контроля тепловых режимов бортовой аппаратуры космических аппаратов.

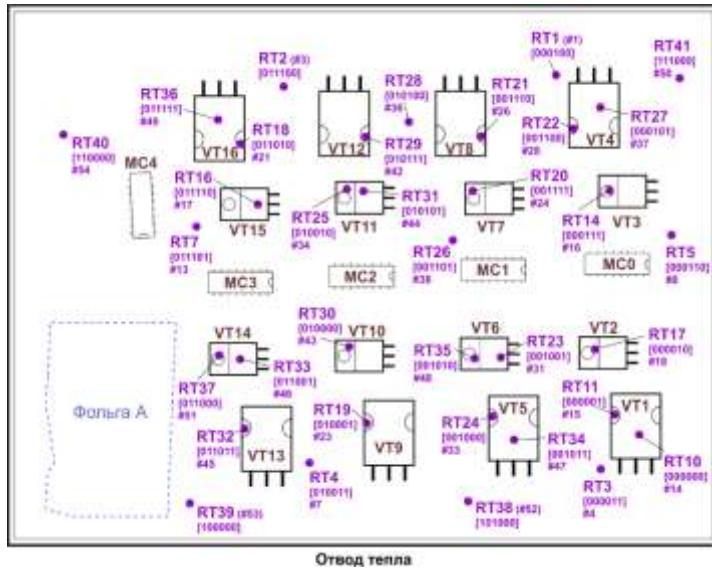
1.5 Предсказание температуры стационарного состояния блока радиоэлектронной аппаратуры по динамическим наблюдениям системы встроенных температурных датчиков

Построен алгоритм прогноза температуры стационарного состояния блока радиоэлектронной аппаратуры (РЭА) по динамическим данным измерений системы температурных датчиков. Алгоритм использует исходные данные о температуре, полученные во время экспериментов на многофункциональном лабораторном стенде, который имитирует работу блока РЭА. Схема размещения нагревающих элементов (мощных транзисторов) на макете РЭА показана на рис. 11А. Стенд обеспечивает работу тепловых имитаторов в атмосферных условиях и в вакууме при давлении не выше $1.3 \cdot 10^{-3}$ Па (10^{-5} мм рт. ст.).

Бортовая РЭА может работать в нескольких штатных режимах. Каждый режим определяется фиксированным набором активных радиоэлементов, которые выделяют тепло, поэтому можно говорить о соответствующих *тепловых режимах работы* РЭА (рис. 11Б). Ранее было показано, что если блок РЭА работает в определенном режиме, то по данным от системы датчиков можно достоверно определить этот режим.

При смене режима работы блока РЭА, температурное поле поверхности платы начинает постепенно изменяться, что фиксируется каждым датчиком. Через некоторое время температурное поле устанавливается соответствующим новому рабочему режиму блока РЭА, и показания датчиков перестают сильно изменяться, т.е. для каждого датчика s устанавливается температура T_s^{st} стационарного состояния, которая зависит только от номера датчика s и режима работы блока РЭА.

А)



Б)

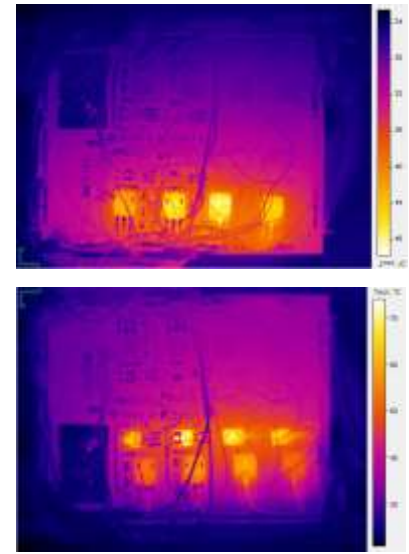


Рисунок 11 – Макет РЭА: А) схема размещения элементов; Б) для сравнения примеры тепловых режимов работы (снимки тепловизором)

Пусть на некотором достаточно большом временном интервале имеются наблюдения за температурой $T_s(t_i)$ в моменты времени $t_i = t_{start} + i\tau$ с равномерным шагом τ . Зафиксируем $K > 0$ в качестве длины окна предсказания и рассмотрим интервал $[t_0 - K\tau, t_0]$ как окно предсказания температуры $T_s^{st}(t_0)$, к которой будут асимптотически стремиться показания сенсора s при сохранении режима работы. Можно показать, что $T_s^{st}(t_0)$ линейно зависит от температуры датчиков в окне предсказания

$$T_s^{st}(t_0) \approx \sum_{k=0}^K q_k T_s(t_0 - \tau k). \quad (1.7)$$

Коэффициенты q_k определяются методом наименьших квадратов из наблюдаемых данных.

Были обработаны данные большой серии экспериментов, которые проводились с помощью лабораторного стенда. Каждый эксперимент состоял из последовательности циклов: 1) быстрая смена режима работы блока РЭА; 2) непрерывная работа в этом режиме до тех пор, пока тепловое поле блока не достигнет устойчивого состояния. Смена режима происходит практически мгновенно, а далее блок работает в заданном режиме до конца цикла. На рис. 12 показаны пример графика мощности, подводимой к одному из

нагревателей в течение серии из 4 циклов (синяя линия в форме лестницы), а также зависимость температуры от времени для двух датчиков, расположенных непосредственно на нагревателе и на поверхности платы вдали от активных нагревателей.

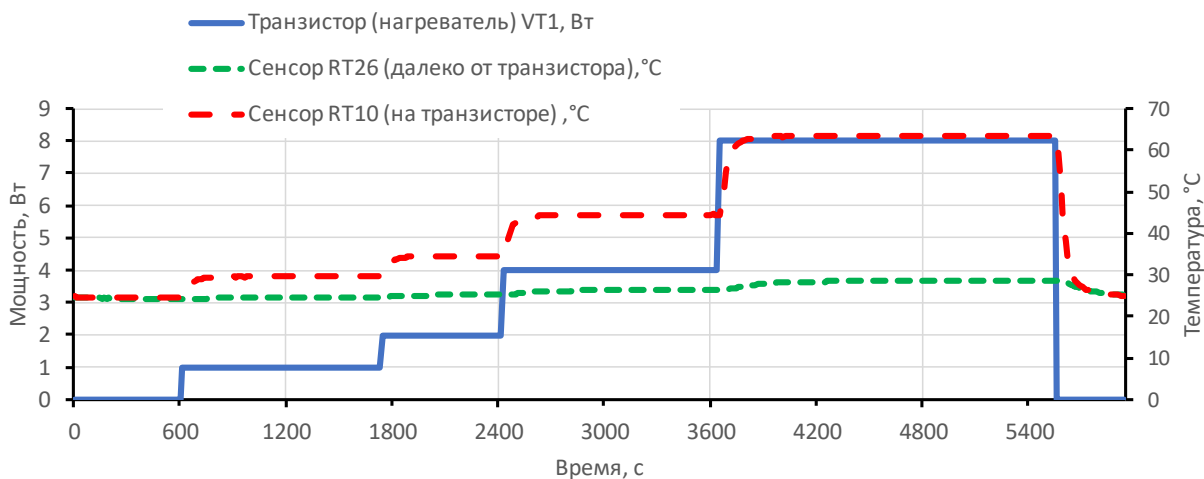


Рисунок 12 – Данные экспериментов

На основе данных обучающей выборки (14186 наблюдений в 99 последовательных циклов продолжительностью около 47 часов) по модели (1) были получены коэффициенты q_k . На рис. 13 показаны условия эксперимента и результаты онлайн-прогноза на тестовой выборке (1010 наблюдений в 6 последовательных циклах продолжительностью около 4 часов) для датчика RT10, расположенного на нагревателе. Для прогноза использовалось окно предсказания равное 5 интервалам (1 минуте). Интервал измерения для датчика составлял 12 секунд.



Рисунок 13 – Результат предсказания для датчика Rt10, расположенного на нагревателе: синяя линия – температура стационарного состояния, черная кривая – фактическая температура показаний датчика, красная линия – результат онлайн-прогноза температуры устойчивого состояния

Из представленных графиков видно, что *стационарная* температура датчика прогнозируется с хорошей точностью. Максимальные ошибки предсказания (пики сплошной красной линии) соответствуют ситуации, при которой момент времени смены режима попадает в окно предсказания и формула (1.7) становится некорректной, поскольку часть данных относится к другому периоду.

Отметим, что, имея набор предсказанных температур системы датчиков, можно воспользоваться ранее построенным классификатором и заблаговременно определить режим работы блока РЭА по неустановившемуся температурному полю. Можно также заподозрить отклонения от нормальной работы блока, если предсказанный набор температур не будет соответствовать ни одному из штатных режимов.

2 Разработка физико-математических моделей и численных алгоритмов для расчетов распределений ионосферных электрических полей и токов, обусловленных источниками различной физической природы

2.1 Разработка физико-математических моделей и численных алгоритмов для расчетов распределений ионосферных электрических полей и токов

В ходе исследований рассмотрены два явления: формирование глобальной электрической цепи и проникновение квазистационарного электрического поля от земной поверхности в ионосферу. Построена модель электрического поля, обеспечивающего ионосферное замыкание глобальной электрической цепи, которая генерируется грозами в атмосфере Земли. Полученное распределение электрического потенциала в ионосфере показано на рис. 14 для типичных условий июля при низкой солнечной активности в 19:00 по Гринвичу. Максимальная разность потенциалов в этом случае составляет около 80 вольт, в другое время может достигать 200 вольт. За счет более адекватного описания ионосферной проводимости в нашей модели электрические поля получаются на порядок меньшими, чем в известной модели Хейса и Робла, в которой из-за несовершенства использованного численного метода пришлось существенно огрубить физическую модель.

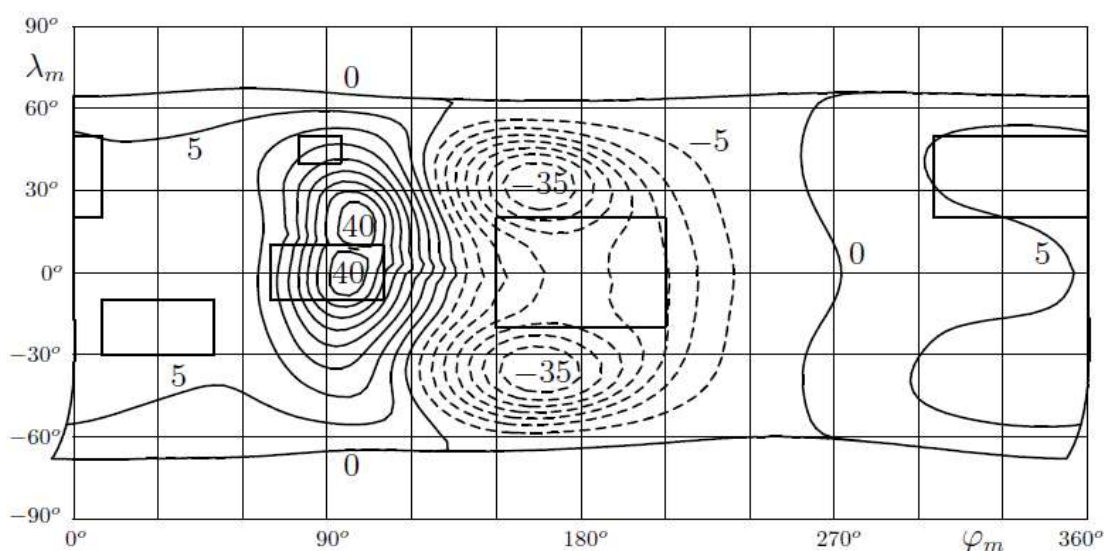


Рисунок 14 – Линии уровня электрического потенциала, создаваемого в ионосфере Земли за счет глобальной грозовой активности, с шагом 5 вольт. Полярные шапки не показаны.

Штриховые линии – отрицательные значения, φ , λ – геомагнитные координаты.

Прямоугольники – основные грозовые области.

Изучению атмосферной части глобальной электрической цепи посвящены сотни работ. При этом ионосфера приближенно рассматривается как идеальный проводник.

Наша модель впервые позволила предсказать создаваемое атмосферными токами распределение электрического поля в ионосфере, тогда как предшественники смогли дать только оценку его напряженности сверху, как оказалось, на порядок завышенную.

Большой практический интерес представляют собой ионосферные возмущения, наблюдаемые над областями с высокой сейсмической активностью, в связи с надеждой их использования как предвестники землетрясений. В настоящее время наиболее популярные модели рассматривают литосферу как генератор, который создает электрический ток или электрическое поле в атмосфере вблизи поверхности Земли. Эти модели учитывают атмосферу и ионосферу как единый проводник и основаны на стационарной модели электропроводности. Другими словами, они рассматривают в качестве физического механизма проникновение квазистационарного электрического поля от земной поверхности в ионосферу. Основанием для появления таких моделей послужили многочисленные наблюдения возмущений вертикальной компоненты атмосферного электрического поля до и после землетрясений. На сегодняшний день известны трехмерные и двумерные модели, в рамках которых показано, что проникающие за счет электропроводности электрические поля практически не могут быть обнаружены спутниковыми измерениями на фоне всегда существующих ионосферных полей, обусловленных магнитосферными и ионосферными генераторами. Однако все такие модели построены для вертикального магнитного поля, и поэтому применимы только в высоких широтах.

Нами построена количественная модель проникновения квазистационарного электрического поля от земной поверхности в ионосферу при наклонном магнитном поле. Построенная двумерная модель применима, когда зона подготовки землетрясения вытянута вдоль магнитного меридиана.

На основании уравнений электропроводности сформулирована эллиптическая краевая задача, которая с помощью разложения в ряд Фурье сведена к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Получены аналитические решения при экспоненциальной зависимости атмосферной и ионосферной проводимости от высоты, а также численные решения для высотного распределения проводимости, соответствующего экспериментальным данным.

На рис. 15 представлен типичный результат расчетов над областью подготовки землетрясения. Показаны проекции на вертикальную плоскость с декартовыми координатами YZ линий тока (сплошные линии, ток между соседними линиями $0.28 \mu\text{A}$, если взять слой толщиной 1 м по X), а также линии уровня X -компоненты плотности тока

(штриховые линии с шагом 1 пА/м^2). Линии тока, уходящие на рисунке вверх, проходят вдоль магнитных силовых линий в сопряженную область ионосферы и там замыкаются. В результате исследований подтверждены и детализированы известные приближенные оценки убывания напряженности проникающего в ионосферу электрического поля с увеличением наклона магнитного поля. Это убывание оказалось незначительным по сравнению со случаем, когда зона подготовки землетрясения вытянута по магнитной параллели.

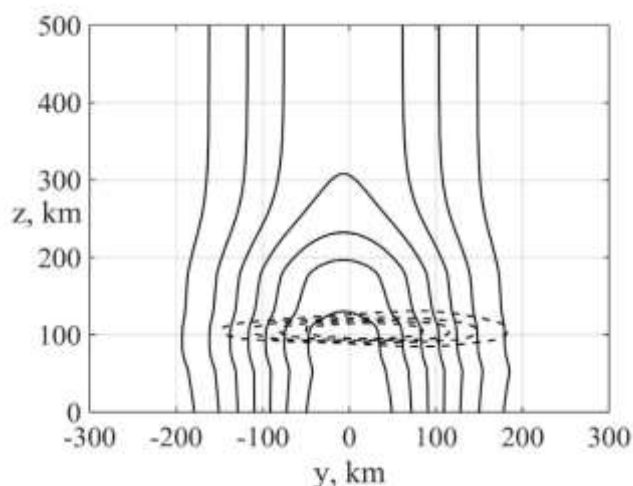


Рисунок 15 – Проекция линий тока (сплошные линии) на вертикальную плоскость с декартовыми координатами YZ и линии уровня X-компоненты плотности тока (штриховые линии) над областью подготовки землетрясения.

2.2 Моделирование неустойчивости токового магнитосферного хвоста

Результатом взаимодействия солнечного ветра с геомагнитным полем является магнитосфера Земли с протяженным геомагнитным хвостом, внутри которого частицы плазмы формируют электрический токовый слой. Этот слой тесно связан с ионосферой Земли, и поэтому его возмущения существенно влияют на состояние ионосферы. Конфигурация токового слоя зависит от ориентации вектора магнитного момента Земли и меняется в процессе движения Земли вокруг Солнца. Показано, что ключевым фактором неустойчивости является изгиб токового слоя, возникающий при сильном наклоне магнитного момента Земли по отношению к скорости солнечного ветра.

В этой связи исследовалась неустойчивость магнитоплазменной конфигурации геомагнитного хвоста по отношению к поперечным волновым возмущениям на основе численного магнитогидродинамического (МГД) моделирования. Использовались МГД модели двух типов: линейная модель размерности 2.5 и нелинейная трехмерная модель. Начальное равновесное состояние задавалось в соответствии с точным решением уравнений Власова-Максвелла для искривленного токового слоя. Расчеты, выполненные с

использованием обеих моделей (линейной и нелинейной), показали неустойчивость искривленного токового слоя по отношению к поперечным волновым возмущениям. Неустойчивые возмущения всегда локализуются со стороны летнего полушария. Характер неустойчивых движений плазмы существенно меняется по мере удаления от Земли в направлении хвоста. Если ближней к Земле области плазма ускоряется и движется вдоль хвоста, то по мере удаления от Земли направление движения становится перпендикулярным плоскости токового слоя хвоста. Такое поведение скорости плазмы и характер изменения параметров фоновой плазмы можно трактовать как переход между двумя различными типами неустойчивых возмущений: модой «двойного градиента» в удаленном хвосте и «баллонной» модой вблизи Земли. Показано также, что неустойчивости развиваются тем быстрее, чем больше наклон вектора магнитного момента Земли и, соответственно, больше изгиб токового слоя. Распределение скорости плазмы (в единицах Альфвеновской скорости) для трех стадий развития неустойчивости представлено на рис. 16. Максимальная скорость отмечается в ближней к Земле зоне (слева), где может достигать на нелинейной стадии неустойчивости значений порядка сотен километров в секунду.

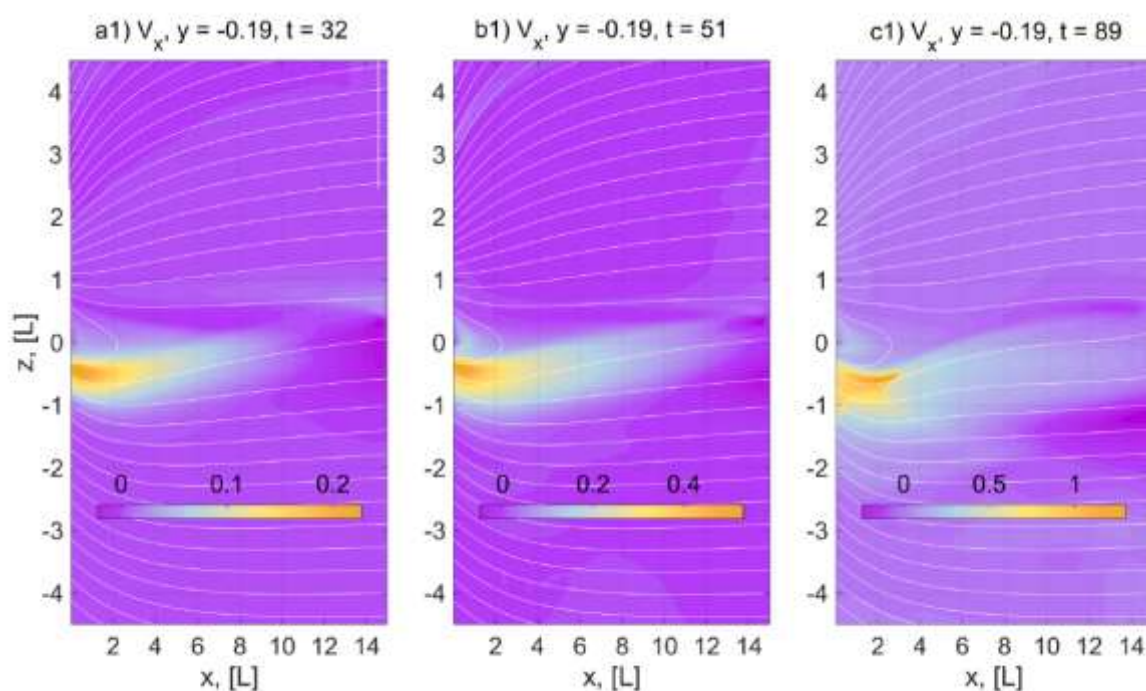


Рисунок 16 – Результаты численного моделирования: цветом показано распределение скорости для различных моментов времени в процессе развития неустойчивости $t = (32, 51, 89)$, координатная ось x направлена вдоль геомагнитного хвоста, оси y и z направлены поперек хвоста, белые кривые – силовые линии геомагнитного поля

3. Разработка численных методов решения уравнений Навье-Стокса для задач аэродинамики с турбулентным режимом путем уточненного учета субсеточных осцилляций. Исследование устойчивости конвективных течений в экспериментальных установках для разделения жидких смесей

3.1. Разработка численных методов решения трехмерных уравнений Навье-Стокса для задач аэродинамики

Для моделирования трехмерного течения вязкого газа рассмотрена система безразмерных трехмерных дифференциальных уравнений Навье-Стокса, включающая уравнение неразрывности

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} + \rho \frac{\partial v}{\partial y} + \rho \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (3.1)$$

уравнения количества движения

$$\begin{aligned} \rho \frac{du}{dt} &= -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z}, \\ \rho \frac{dv}{dt} &= -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z}, \\ \rho \frac{dw}{dt} &= -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

и уравнение для внутренней энергии

$$\rho \frac{de}{dt} = -P \left(\frac{du}{dx} + \frac{dv}{dy} + \frac{dw}{dz} \right) - \frac{dq_x}{dx} - \frac{dq_y}{dy} - \frac{dq_z}{dz} + \Phi. \quad (3.3)$$

Здесь $d(\cdot)/dt$ – субстанциональная, или полная, производная

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + v \frac{\partial \rho}{\partial y} + w \frac{\partial \rho}{\partial z}.$$

Компоненты тензора напряжений имеют следующий вид:

$$\tau_{xx} = \frac{2}{3\text{Re}} \mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial w}{\partial z} \right), \tau_{yy} = \frac{2}{3\text{Re}} \mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial w}{\partial z} \right), \tau_{zz} = \frac{2}{3\text{Re}} \mu \left(2 \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right),$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \frac{\mu}{\text{Re}} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \tau_{yz} = \tau_{zy} = \frac{\mu}{\text{Re}} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right), \tau_{xz} = \tau_{zx} = \frac{\mu}{\text{Re}} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right).$$

Функции теплового потока q_x , q_y и q_z заданы в виде

$$q_x = \frac{\mu}{(\gamma-1)M^2 \text{Re Pr}} \frac{\partial T}{\partial x}, \quad q_y = \frac{\mu}{(\gamma-1)M^2 \text{Re Pr}} \frac{\partial T}{\partial y}, \quad q_z = \frac{\mu}{(\gamma-1)M^2 \text{Re Pr}} \frac{\partial T}{\partial z},$$

а диссипативная функция Φ равна

$$\Phi = \mu \left[2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 - \right. \\ \left. - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right].$$

Замыкают систему дифференциальных уравнений алгебраические соотношения

$$P = (\gamma-1)\rho e, \quad \mu = (\gamma(\gamma-1)M^2 e)^\omega, \quad T = \gamma(\gamma-1)M^2 e.$$

Искомыми величинами являются функции плотности ρ , скорости u , v , w и внутренней энергии e . Величины γ , ω , M , Re и Pr зависят от параметров газа, поэтому считаются при численном моделировании постоянными и известными. При проведении расчетов использованы следующие значения:

$$\gamma = 1.4, \quad \omega = 0.8, \quad M = 2.37 \cdot 10^{-2}, \quad \text{Re} = 1.13 \cdot 10^5, \quad \text{Pr} = 0.75.$$

Вычислительная область D представляет собой внутреннюю часть цилиндра (радиус цилиндра равен 1, высота цилиндра равна 10) и параллелепипеда длинны 10, ширины 10 и высоты 20, представленных схематично на рис. 17. Система уравнений (1)-(3) дополнена

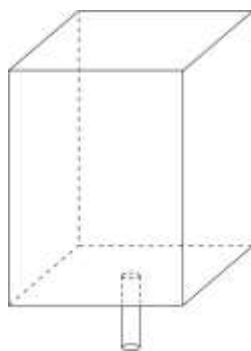


Рисунок 17 – Вычислительная область

начальными и краевыми условиями. Нижняя граница цилиндра является границей интенсивного втекания потока газа, верхняя и боковые грани параллелепипеда являются границами вытекания. Нижняя грань параллелепипеда представляет собой границу втекания с малыми скоростями. На боковой поверхности цилиндра ставятся условия непротекания (для функций скорости) и отсутствие потока энергии через границу (для функции энергии).

Для поиска численного решения использована пространственная сетка D^h с шагом h такая, что каждый узел сетки лежит внутри либо на границе вычислительной области D (рис. 18), и сетка $T^\tau = \{t_m : t_m = \tau m, m = 0, \dots, M\}$ с шагом $\tau = T/M$, где $t \in [0, T]$.

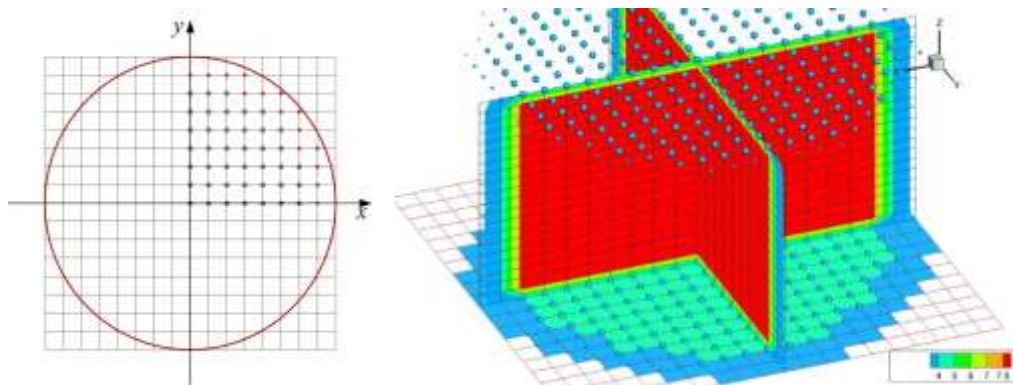


Рисунок 18 – Узлы вычислительной сетки внутри цилиндра

Численное решение уравнений (3.1)-(3.3) на каждом временном слое найдено в виде кусочно-трилинейных функций ρ^h , u^h , v^h , w^h , e^h . Для поиска численного решения системы уравнений (3.1)-(3.3) на очередном слое по времени использовался метод расщепления. Сначала полулагранжевым методом решалось уравнение неразрывности (3.1), а потом найденные значения функции плотности ρ^h использовались для решения системы уравнений количества движения (3.2). Вычисленные значения функции скорости

u^h , v^h , w^h подставлялись в уравнение для внутренней энергии. После этого вновь решалось уравнение неразрывности. Вычислительные эксперименты показали, что через 5-6 итераций численное решение системы (3.1)-(3.3) стабилизируется. Построение численного решения уравнения неразрывности (3.1) осуществлено явным полулагранжевым методом. Для этого значение искомой функции ρ^h во внутреннем узле (x_i, y_j, z_k) сетки D^h на очередном m -ом временном слое определено по формуле

$$\rho^h(t_m, x_i, y_j, z_k) = \frac{1}{h^3} \int_{W_{i,j,k}^{h,m-1}} \rho^h(t_{m-1}, x, y, z) dx dy dz,$$

где $W_{i,j,k}^{h,m-1}$ - кубоид с вершинами в точках W_p^h , $p=1, \dots, 8$. Численное решение уравнений количества движения (3.2) и уравнения для внутренней энергии (3) на очередном временном слое t_m найдено с помощью комбинации полулагранжевого метода и метода конечных элементов. Для этого задача поиска численного решения переписывается в слабой постановке. Например, для функции скорости u^h выписано интегральное уравнение

$$\int_{\Omega_{i,j,k}} \rho \frac{du}{dt} \varphi_{i,j,k} d\Omega = \int_{\Omega_{i,j,k}} \left(-\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} \right) \varphi_{i,j,k} d\Omega, \quad (3.4)$$

где $\varphi_{i,j,k}$ – трилинейная базисная функция, равная 1 в узле (x_i, y_j, z_k) сетки D^h и равная 0 во всех остальных узлах. Для вычисления левой части (3.4) использована аппроксимация, основанная на приближенном вычислении субстанциональной производной

$$\int_{\Omega_{i,j,k}} \rho \frac{du}{dt} \varphi_{i,j,k} d\Omega \approx \rho^h(t_m, x_i, y_j, z_k) \frac{u^h(t_m, x_i, y_j, z_k) - u^h(t_{m-1}, x_i^*, y_j^*, z_k^*)}{\tau} h^3.$$

Здесь $(t_{m-1}, x_i^*, y_j^*, z_k^*)$ точка пересечения характеристической траектории, выпущенной из узла (t_m, x_i, y_j, z_k) на нижний слой по времени. Для вычисления правой части соотношения (3.4) используется метод интегрирования по частям (для слагаемых, включающих в себя вторую частную производную) и применение квадратурных формул. Для решения полученной системы линейных алгебраических уравнений, возникающей при решении трех уравнений количества движения, использован итерационный метод Якоби.

В рамках вычислительного эксперимента рассмотрена задача о течении газа в трубе, нагретого до температуры 1000 К со скоростью на границе втекания 15 метров в секунду. На рис. 19 слева представлены векторы скорости в области над трубой, а справа – значения функции плотности. Как видно из рисунков, в области над трубой возникают вихревые течения, приводящие к формированию фигур вида тор для функции плотности.

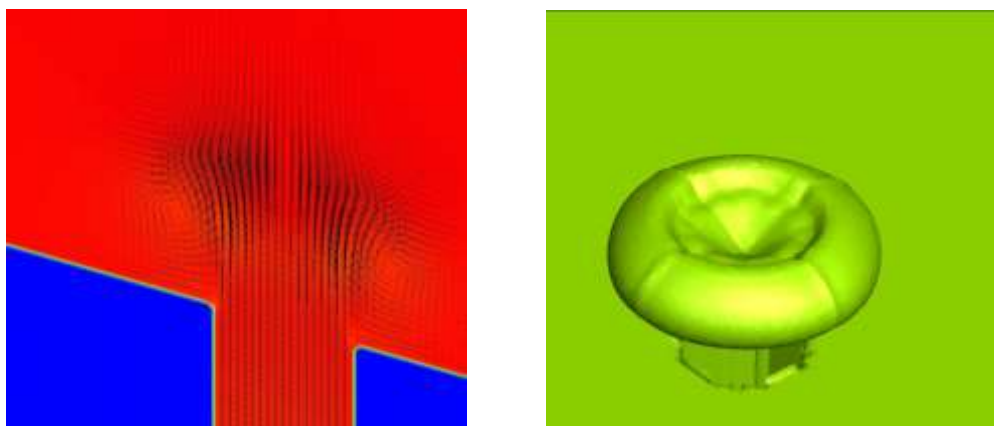


Рисунок 19 – Векторы скорости в области над трубой (слева), значения функции плотности (справа)

3.2 Исследование устойчивости конвективных течений в экспериментальных установках для разделения жидких смесей

Необходимым условием корректного измерения коэффициентов переноса в смесях является молекулярный перенос тепла и массы в отсутствие конвекции или устойчивость определенного конвективного течения, в котором теплоперенос происходит в контролируемом режиме. Одним из механизмов развития неустойчивости является аномальная термодиффузия (аномальный эффект Соре), при котором тяжелые компоненты накапливаются в нагретой области, т.е. в верхней части экспериментальной установки, что создает потенциально неустойчивую стратификацию. Конфигурацию вертикального слоя (плоского, а также слоя между коаксиальными цилиндрами) имеет термодиффузионная колонна – экспериментальная установка для измерения коэффициентов термодиффузии.

Рассмотрим задачу об устойчивости конвективного течения в плоском вертикальном слое (рис. 20). Между стенками, расположенными на расстоянии $2L$, приложена разность температур ΔT . В основном состоянии жидкость у нагретой границы поднимается вверх, а вблизи холодной границы – опускается вниз под действием силы тяжести. При наличии термодиффузии происходит разделение смеси под действием разности температур в

горизонтальном направлении, что вместе с конвективным потоком приводит к разделению смеси в вертикальном направлении. Если в верхней части происходит накопление тяжелой компоненты, то течение может стать неустойчивым. Также гидродинамическая неустойчивость может развиваться благодаря образованию вихрей на границе встречных потоков в центральной части слоя.

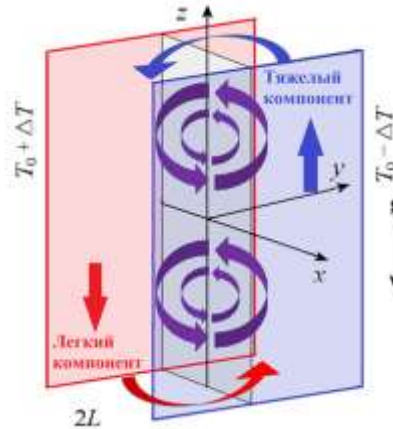


Рисунок 20 – Схема плоского вертикального слоя

Для решения задачи об устойчивости будем использовать уравнения Навье–Стокса, дополненные уравнениями переноса тепла и массы, в безразмерном виде. На вертикальных границах задаются условие прилипания, условие постоянных (различных) температур и отсутствие потока массы компонентов. Безразмерные переменные (время, вектор координат, давление, температура, вектор концентраций) вводятся так

$$t = \frac{L^2}{\nu} t', \quad \mathbf{x} = L\mathbf{x}', \quad \mathbf{u} = \frac{\nu}{L} \mathbf{u}', \quad p = \rho_0 \frac{\nu^2}{L^2}, \quad T - T_0 = \Delta T T', \quad \mathbf{C} - \mathbf{C}_0 = \beta_T \Delta T B^{-1} \mathbf{C}. \quad (3.5)$$

Далее, представим поля скорости, давления, температуры и концентраций в виде суммы основного состояния $\mathbf{u}_s(\mathbf{x}), p_s(\mathbf{x}), T_s(\mathbf{x}), \mathbf{C}_s(\mathbf{x})$ и малых возмущений $\mathbf{u}(t, \mathbf{x}), p(t, \mathbf{x}), T(t, \mathbf{x}), \mathbf{C}(t, \mathbf{x})$. После линеаризации уравнений относительно основного состояния, получим систему уравнений

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}_s + (\mathbf{u}_s \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} + \text{Gr}(T + I \cdot \mathbf{C}) \mathbf{e}_z, \quad (3.6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T_s + (\mathbf{u}_s \cdot \nabla) T = \text{Pr}^{-1} \nabla^2 T,$$

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{C}_s + (\mathbf{u}_s \cdot \nabla) \mathbf{C} = S\mathbf{C}(\nabla^2 \mathbf{C} - \boldsymbol{\psi} \nabla^2 T).$$

где $\mathbf{e}_2 = (0, 1)$ (рассматриваются двумерные уравнения) и использованы следующие безразмерные параметры: $S\mathbf{C} = \nu^{-1} BDB^{-1}$, $\{S\mathbf{C}\}_{ij} = \beta_i \beta_j^{-1} S c_{ij}^{-1}$, $S c_{ij} = \nu / D_{ij}$ – числа Шмидта, $Gr = g \beta_T \Delta T L^3 / \nu^2$ – число Грасгофа, $\boldsymbol{\psi} = -\beta_T^{-1} B D^{-1} \mathbf{D}_T$ – вектор отношений разделения. Последний вектор характеризует горизонтальное разделение смеси под действием термодиффузии, при этом, если $\psi_i > 0$ ($\psi_i < 0$), более легкие (тяжелые) компоненты накапливаются в более теплой области, а более тяжелые (легкие) в более холодной. Кроме того, \mathbf{D}_T – вектор коэффициентов термодиффузии размерности $n-1$, D – матрица коэффициентов диффузии размерности $(n-1) \times (n-1)$, β_T – коэффициент теплового расширения, B – диагональная матрица коэффициентов концентрационного расширения, $\text{Pr} = \nu / \chi$ – число Прандтля, где ν – кинематическая вязкость, χ – коэффициент теплопроводности.

Наиболее опасные возмущения в общем случае могут быть трехмерными. Рассмотрим нормальные трехмерные возмущения в виде

$$(u, v, w, p, T, \mathbf{C}) = (u(x), v(x), w(x), p(x), \theta(x), \boldsymbol{\xi}(x)) \exp(-\lambda t + i(l y + k z)), \quad (3.7)$$

где $\lambda = \lambda_r + i\omega$ – комплексный декремент, l и k – волновые числа в направлениях y и z , соответственно. Подставляя представление (3.7) в уравнения (3.6), получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений для амплитуд возмущений:

$$\begin{aligned} \Delta u - p' + (\lambda - ikw_s)u &= 0, \\ \Delta v - ilp + (\lambda - ikw_s)v &= 0, \\ \Delta w - ikp + (\lambda - ikw_s)w - w'_s u + \text{Gr}(\theta + \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{\xi}) &= 0, \\ \text{Pr}^{-1} \Delta \theta + (\lambda - ikw_s)\theta - T'_s u &= 0, \\ S\mathbf{C}(\Delta \boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\psi} \Delta \theta) + (\lambda - ikw_s)\boldsymbol{\xi} - \mathbf{C}'_s u - A w &= 0, \\ u' + i(lv + kw) &= 0. \end{aligned}$$

с граничными условиями

$$x = \pm 1: \quad u = v = w = 0, \quad \theta = 0, \quad \xi' - \psi\theta' = 0.$$

Здесь $\Delta = \partial^2 / \partial x^2 - (k^2 + l^2)$; штрих обозначает $\partial / \partial x$; $A = \partial C / dz$ характеризует вертикальное разделение смеси. В общем случае суммарным отношением разделения называется параметр $\Psi = \psi_1 + \dots + \psi_{n-1}$. Для бинарной смеси Ψ является скаляром.

Типичная структура нейтральных кривых для продольных возмущений в бинарной смеси с параметрами $Pr = 10$, $Sc = 500$, $\Psi = 0.5$ показана на рис. 21. Имеются две моды неустойчивости – монотонная и колебательная, причем последняя является наиболее опасной. Для колебательной моды система является неустойчивой внутри штрихованных линий на рис. 21а, например, при $l = 0$. Для монотонной моды область неустойчивости лежит выше сплошных линий (см. рис. 21а). Заметим, что при увеличении волнового числа l в направлении оси y начиная с $l = 0$, нейтральные кривые перемещаются в область больших чисел Грасгофа для всех значений волнового числа k в направлении оси z . Таким образом, наиболее опасными являются двумерные возмущения в плоскости xz (см. рис. 21б).

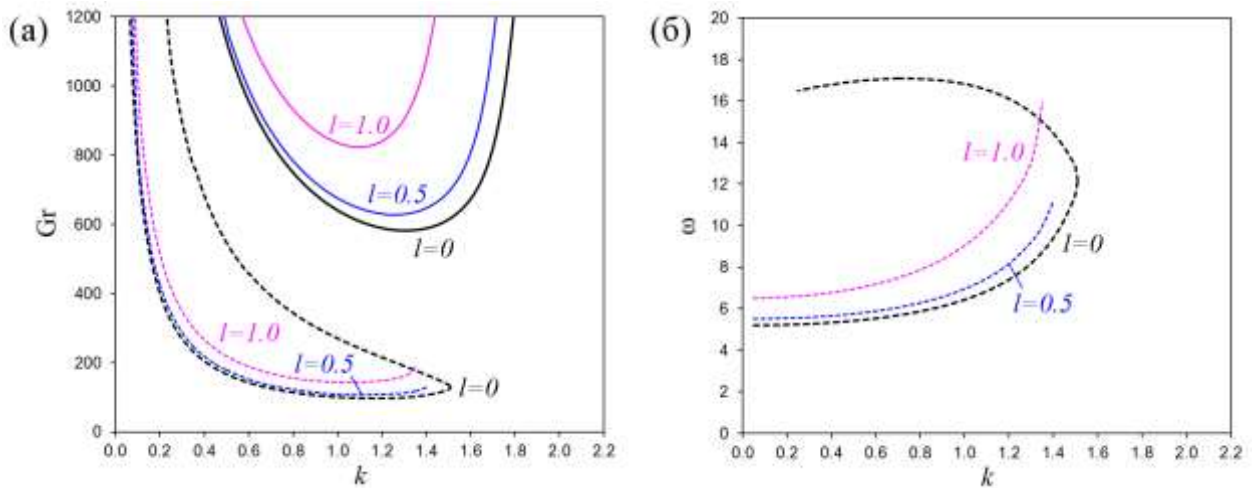


Рисунок 21 – Нейтральные кривые для бинарной смеси с параметрами $Pr = 10$, $Sc = 500$, $\Psi = 0.5$. Зависимость критического числа Грасгофа (а) и критической частоты (б) от волнового числа k для различных значений волнового числа l . Монотонная мода – сплошные линии, колебательная мода – штрихованные.

Критическое значение числа Грасгофа соответствует минимуму нейтральной кривой. При разности температур, соответствующей критическому значению, основное конвективное течение становится неустойчивым.

4 Математическое моделирование стохастической динамики резонансных частиц в когерентных лазерных пучках с учетом выпрямленных градиентных сил

В отчетном периоде проведена большая серия численных экспериментов на суперкомпьютере MVS-10P в Межведомственном суперкомпьютерном центре РАН (г. Москва) для исследования стохастической динамики ансамбля из нескольких десятков резонансных ионов ртути в интерферирующих полихроматических оптических полях. Математическая модель представляет собой систему мультипликативных стохастических дифференциальных уравнений для искомых координат и скоростей ионных частиц. В модели учитывали четыре вида действующих сил: сила оптического захвата частиц, силы трения (т. е. охлаждающие силы), кулоновские силы отталкивания и случайные силы, обусловленные квантовыми флуктуациями. Для вычисления различных осредненных характеристик данной физической задачи применялся метод Монте-Карло. Количество отдельных решений исходной системы уравнений (т.е. независимых реализаций) изменялось в разных вариантах от 2^{13} до 2^{14} . Число используемых вычислительных ядер (процессоров) изменялось от 128 до 512. Время счета одного варианта составляло обычно от нескольких часов до одних суток.

Целью работы является обоснование нового метода чисто оптического (т.е. без использования электростатических и магнитостатических полей) долговременного пленения и глубокого охлаждения ансамбля ионов. Метод основан на использовании выпрямленных градиентных сил (ВГС), создающих диссипативную оптическую сверхрешётку (ОС), и открывает возможность улучшения характеристик ионных ловушек,

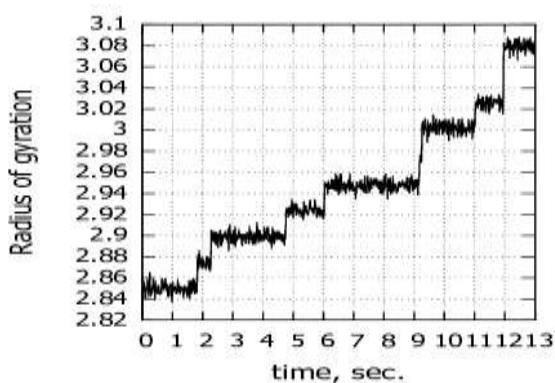


Рисунок 22 – Изменение радиуса гирации (меры компактности ансамбля ионов) при разрушении высокоупорядоченной метастабильной конфигурации ионов для типичной реализации стохастического процесса. Резкие “скачки” на кривой обусловлены квантовыми флуктуациями оптических сил. Каждый скачок сопровождается понижением степени упорядоченности и локализации ионов

имеющих обширную область важных применений. Для рассмотренных начальных пространственных конфигураций ионов и в отсутствие ОС облако ионов быстро расширяется за характерные времена $\sim 10^{-4}$ секунды в результате так называемого кулоновского взрыва (следствие теоремы Ирншоу). Компьютерное моделирование динамики (9, 16, 25 и 49-частичных) ионных ансамблей показывает, что действие ОС на ионы может приводить к эффективному тушению кулоновского взрыва и образованию долгоживущих (метастабильных) квазиплоских ионных кулоновских кристаллов (ИКК) с температурой T порядка нескольких мК и параметром кулоновского взаимодействия $\Gamma_c \gg 1$.

Конечность времени жизни ИКК обусловлена совместным действием кулоновских сил и квантовых флуктуаций оптических сил, которые проявляются в виде редких быстрых случайных скачков ионов в ближайшие незанятые ячейки ДОС (рис.22).

При этом разрушение ИКК имеет ярко выраженный двухстадийный характер: на первой стадии происходит образование вакансий в периферийной части ИКК, т.е. постепенное накопление “дефектов” кристаллической структуры во внешних слоях ИКК при сохранении конфигурации его центрального кристаллического ядра (ЦКЯ); затем, на больших временах, аналогичным образом разрушается ЦКЯ. Важнейшим результатом выполненных исследований является обнаружение гигантского увеличения (на несколько порядков величины) характерных времён разрушения ИКК при относительно небольших изменениях периода ДОС от 0.35 мм до 0.7 мм (рис. 23).

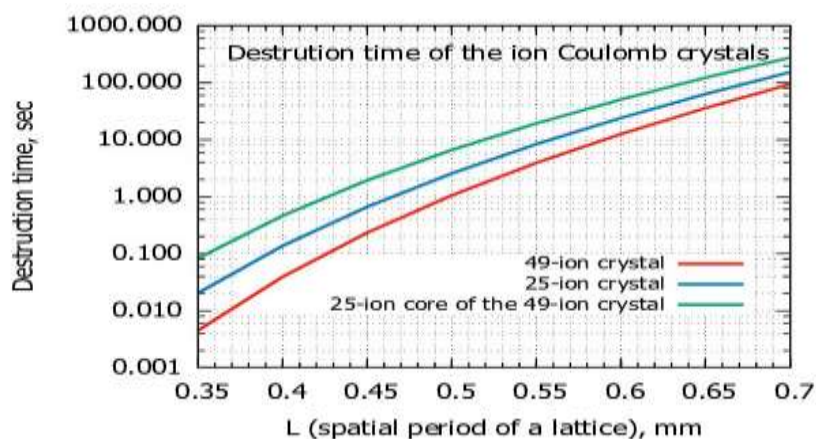


Рисунок 23 – Зависимость времени разрушения ионных кулоновских кристаллов от периода оптической решетки. Наблюдается гигантское увеличение времени разрушения при относительно небольших вариациях периода решетки L . Вертикальная ось времени изображена в логарифмическом масштабе.

Анализ компьютерных расчётов показывает, что зависимость времён t_d разрушения ИКК при фиксированных значениях интенсивностей оптических полей высокой

точностью подчинена закону Аррениуса с нелинейной зависимостью эффективной энергии активации \check{E} (в единицах $k_B T$) от L

$$t_d = C \exp\{-\hat{E}(L)\}, \quad \hat{E}(L) = AL - (B/L), \quad (4.1)$$

где коэффициенты C , A и B не зависят от L и определяются посредством компьютерных расчётов стохастических траекторий ионов, усреднённых по большому ансамблю реализаций стохастического процесса, для трёх фиксированных значений периода ДОС из рассматриваемого интервала изменений L . Равенство (4.1) описывает эффект совместного влияния квантовых флуктуаций и кулоновского отталкивания частиц на время разрушения ИКК, объясняет чрезвычайно высокую чувствительность t_d к изменению L и позволяет предсказывать значения периода ДОС, обеспечивающие чисто оптическое удержание ИКК полихроматическим лазерным светом в течение времени от малых долей секунды до полутора минут.

Другое направление исследований – теоретическое обоснование предложенной ранее “тёмной” оптической ловушки для атомов принципиально нового типа: так называемой бихроматической тёмной оптической ловушки (БТОЛ), рис 24. Удержание частиц в такой ловушке основано на действии на них выпрямленных бихроматических сил в поле специальной комбинации косинус-гауссовских недифрагирующих лазерных

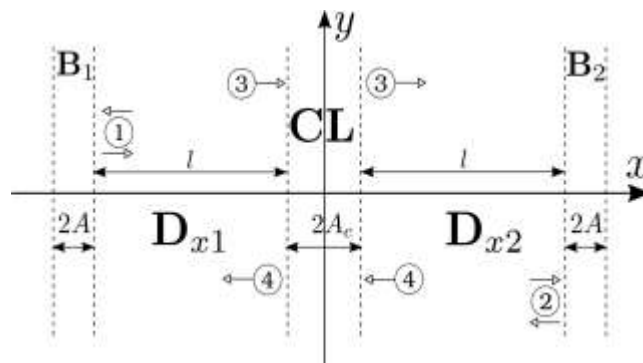


Рисунок 24 – Схема одномерной бихроматической темной охлаждающей ловушки с охлаждающим слоем. V_1 , V_2 и CL – области (слои) локализации бихроматического поля. Область V_1 – светоиндуцированный отталкивающий барьер для частиц, которые падают на них справа (частица 1 на рисунке), V_2 – светоиндуцированный отталкивающий барьер для частиц, которые падают на них слева (частица 2). CL – охлаждающий слой, в котором на частицы (например, частицы 3 и 4 на рисунке) действует светоиндуцированная сила трения, компенсирующая нагрев атомов, обусловленный квантовыми флуктуациями оптических сил. D_{x1} и D_{x2} – тёмные области, свободные от излучения. Размеры этих областей значительно превышают размеры отталкивающих барьеров и охлаждающего слоя

пучков. Построенные математические модели БТОЛ предсказывают её следующие фундаментальными свойства: светоиндуцированные потенциальные барьеры, препятствующие выходу атомов из БТОЛ, локализованы в узких пространственных областях вблизи её границы; тёмные области БТОЛ, свободные от излучения, имеют размеры, значительно превышающие диаметры лазерных пучков и размеры областей локализации оптического поля; глубина БТОЛ может на несколько порядков величины превышать глубину традиционных дипольных монохроматических тёмных ловушек и может быть сравнима с характерными глубинами знаменитых магнито-оптических ловушек $\sim 1\text{К}$; БТОЛ является диссипативной ловушкой и способна охлаждать частицы до температур $\ll 1\text{К}$. Показано, что распределение частиц по энергиям ε в БТОЛ может иметь вид распределения Гсаллиса (со степенными "хвостами"). При этом описан новый механизм формирования подобных распределений – нелокальный характер кинетики частиц в БТОЛ, подчинённой уравнению Фоккера-Планка в энергетическом пространстве с коэффициентами, нелокально зависящими от световых полей.

5. Создание математических моделей транспорта ионов в наноструктурах под действием электрического поля и сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными

В настоящее время активно развиваются исследования, связанные с использованием наноструктурированных мембранных материалов для разделения смесей и получения чистых веществ. Такие материалы находят применение в химической, топливно-энергетической, медицинской и пищевой отраслях промышленности. Мембраны с размером пор в нанометровом диапазоне (1–100 нм) позволяют селективно выделять соединения с низким молекулярным весом и многовалентные ионы из растворов. Одним из современных направлений является разработка «умных» мембран, которые способны влиять на транспортные свойства целевых компонентов посредством внешнего воздействия. В случае заряженных компонентов в качестве такого воздействия может выступать электрическое поле, создаваемое проводящей поверхностью пор.

Работы этого года были посвящены разработке математической модели ионной проводимости нанопоры с проводящей поверхностью, проведению расчетов и сравнению полученных результатов с экспериментальными данными. Рассматривается цилиндрическая пора длины L и радиуса R , соединяющая два резервуара, в которых поддерживается постоянная концентрация C_0 бинарного 1:1 электролита. Между резервуарами имеется постоянная разность потенциалов U (при этом в резервуарах задаются потенциалы $\pm U/2$ соответственно), в то время как потенциал поверхности поры равен Φ_s . Удельная проводимость нанопоры (См/м) определяется как

$$\kappa = -\frac{I L}{U A}, \quad (5.1)$$

где I – ионный ток, $A = \pi R^2$ – площадь поперечного сечения поры.

Математическое моделирование ионной проводимости осуществляется на основе модели пространственного заряда, которая является следствием двумерных уравнений Навье-Стокса, Нернста-Планка и Пуассона (Ryzhkov I.I. et al, Phys. Rev. Letters, 2017. V. 119, 226001). Введем характерные масштабы продольного L и радиального R направлений, потенциала $R_g T / F$, концентрации ионов C_0 , давления $R_g T C_0$ и скорости

D_- / R . После перехода к безразмерным величинам потенциал φ , концентрации ионов c_{\pm} и давление p представляются в виде

$$\begin{aligned}\varphi(r, z) &= \phi_v(z) + \psi(r, z), & c_{\pm}(r, z) &= c_v(z) \exp(\mp \psi(r, z)), \\ p(r, z) &= p_v(z) + 2c_v(z) \cosh(\psi(r, z)).\end{aligned}$$

Функция ψ является решением уравнения Пуассона с граничным условием осевой симметрии

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi(r, z)}{\partial r} \right) = \frac{c_v(z)}{\lambda^2} \sinh(\psi(r, z)), \quad \frac{\partial \psi}{\partial r}(0, z) = 0. \quad (5.2)$$

Здесь $\lambda = \sqrt{\varepsilon \varepsilon_0 R_g T / 2C' F^2} R^{-1}$ – безразмерная длина Дебая, R_g – универсальная газовая постоянная, T – температура, F – постоянная Фарадея, ε_0 – электрическая постоянная, ε – относительная диэлектрическая проницаемость, $C' = 1$ мМ – постоянная (характерная) концентрация ионов, D_{\pm} – коэффициенты диффузии катиона и аниона соответственно.

В случае постоянного потенциала на поверхности поры задается граничное условие

$$\varphi(1, z) = \varphi_s - \phi_v(z), \quad (5.3)$$

где φ_s – безразмерный потенциал поверхности.

Переменные $\phi_v(z)$, $c_v(z)$ и $p_v(z)$ находятся в результате решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\left(\frac{dp_v}{dz}, \frac{1}{c_v} \frac{dc_v}{dz}, \frac{d\phi_v}{dz} \right)^T = L(\bar{v}, \bar{j}, \bar{i})^T, \quad (5.4)$$

где \bar{v} – объемный поток (скорость), $\bar{j} = \bar{j}_+ + \bar{j}_-$ – полный поток ионов, $\bar{i} = \bar{j}_+ - \bar{j}_-$ – ионный ток (все потоки безразмерные и осредненные по поперечному сечению), $L = -(\tilde{L})^{-1}$ – матрица размерности 3×3 , которая определяется через функции $\psi(r, z)$ и $c_v(z)$.

При моделировании ионной проводимости поры граничные условия для системы (5.4) имеют вид

$$\begin{aligned} z=0: & \quad p_v = -2c_0, & c_v = c_0, & \phi_v = \phi_L, \\ z=1: & \quad p_v = -2c_0, & c_v = c_0, & \phi_v = \phi_R. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Они соответствуют постоянным концентрациям и равным полным давлениям в резервуарах. Безразмерная разность потенциалов между резервуарами определяется как $\Delta\phi = \phi_R - \phi_L$.

В работе был предложен метод расчета проводимости поры путем совместного решения задач (5.2), (5.3) и (5.4), (5.5). В результате определяется безразмерное значение ионного тока \bar{i} . Из (5.1) для удельной проводимости получается формула

$$\kappa = -\frac{D_0 C_0 F^2}{R_g T} \frac{\bar{i}}{\phi_R - \phi_L}.$$

На рис. 25 показана зависимость ионной проводимости поры от потенциала ее поверхности для различных разностей потенциалов между резервуарами. Минимум проводимости достигается при нулевом потенциале поверхности и разности потенциалов, стремящейся к нулю. Это значение соответствует водному раствору KCl с концентрацией 10 мМ. Увеличение абсолютной величины потенциала поверхности приводит к

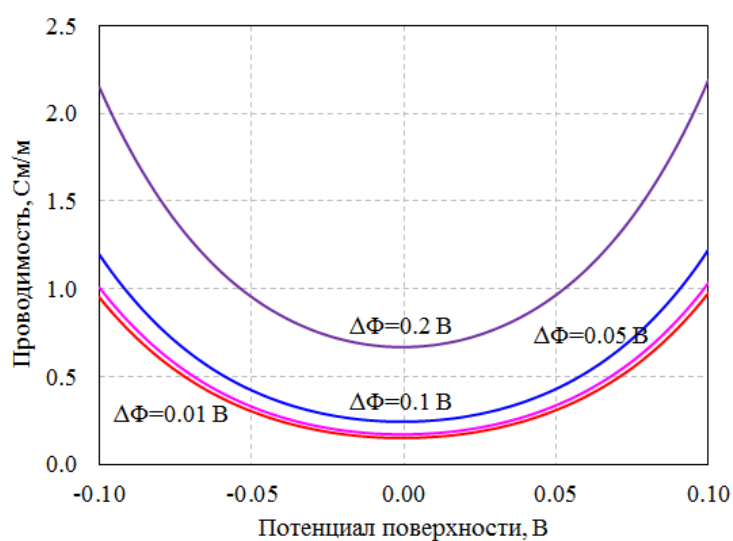


Рисунок 25 – Зависимость ионной проводимости поры от потенциала ее поверхности для различных разностей потенциалов. Водный электролит 10 мМ KCl, $R = 2$ нм

повышению концентрации противоионов внутри поры (т.е. носителей заряда), что вызывает соответствующий рост ионной проводимости. В то же время, на графиках видно, что проводимость растет с увеличением приложенной разности потенциалов. Этот эффект связан с поляризацией проводящей поверхности электрическим полем внутри поры (Ryzhkov I.I. et al, Phys. Rev. Letters, 2017. V. 119, 226001). В результате на поверхности поры формируется электронный заряд, меняющийся от отрицательного к положительному в направлении электрического поля. Это, в свою очередь, вызывает увеличение концентрации анионов (катионов) в области положительного (отрицательного) заряда соответственно. Таким образом, внутри поры растет концентрация носителей заряда, что и объясняет рост ионной проводимости с увеличением приложенной разности потенциалов.

На рис. 26 показаны вольтамперные кривые для системы из 3 углеродных нанотрубок, полученные экспериментально в работе Yazda et al, Nanoscale, 2017, 9, 11976. Видно, что ионный ток увеличивается с ростом приложенной разности потенциалов нелинейным образом. Это свидетельствует о зависимости проводимости от разности потенциалов. Хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных свидетельствует в пользу гипотезы о том, что рост проводимости обусловлен поляризацией проводящей поверхности поры внешним электрическим полем. Таким образом, в ходе работы

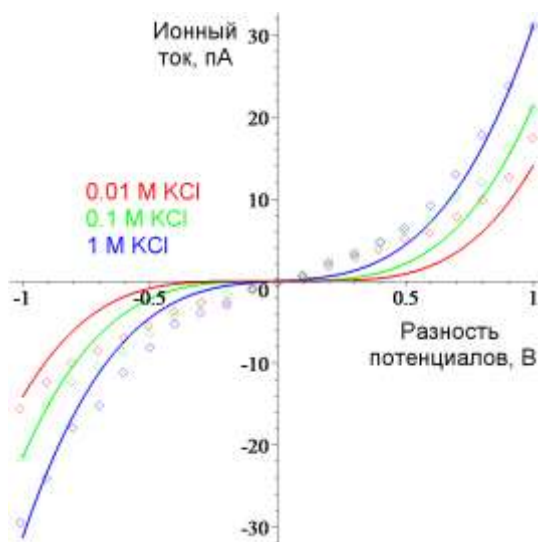


Рисунок 26 – Вольтамперные кривые для углеродных нанотрубок. Точки – экспериментальные данные (Yazda et al, Nanoscale, 2017, 9, 11976), кривые – численный расчет. Водный электролит KCl, $R = 0.7$ нм, $L = 40$ мкм

построена математическая модель ионной проводимости нанопоры с проводящей поверхностью и получено хорошее согласие экспериментальных и расчетных данных.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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

Разработана вычислительная модель для расчета тепловых режимов блоков бортовой аппаратуры космических аппаратов, позволяющая рассчитывать температурные поля поверхностей плат блока и температуры радиоэлементов для заданных режимов тепловыделения элементов, температуры теплоотводящего основания и внешних тепловых потоков. Модель необходима для контроля и анализа тепловых режимов блоков бортовой аппаратуры по показаниям температурных датчиков. На основе модели в дальнейшем будут разработаны и опробованы алгоритмы восстановления тепловых полей блока для оперативного контроля тепловых режимов по показаниям встроенных температурных датчиков.

Предложен численный метод определения параметров теплофизической модели блока по экспериментальным данным на основе решения задачи многомерной оптимизации. Метод позволяет определять параметры модели, отражающие индивидуальные теплофизические характеристики конкретного экземпляра блока. Метод в дальнейшем будет использоваться для построения и настройки математических теплофизических моделей реальных блоков бортовой аппаратуры на стадии их отработки и испытаний.

Сначала вычислительная модель апробирована на макете блока бортовой аппаратуры. На основе сравнения численных и физических экспериментов, проведенных в Институте с этим макетом, был опробован численный метод уточнения параметров модели по измеренным показаниям встроенных датчиков и по термограммам, полученных для различных режимов тепловыделения и внешних условий. В результате получена вычислительная модель с настроенными параметрами, позволяющая проводить расчеты тепловых режимов макета, отклонение которых от экспериментальных данных лежит в пределах ± 2.5 градуса в диапазоне температур теплоотводящего основания от -10 до $+60^\circ\text{C}$ с мощностью тепловыделения до 64 Вт на блок.

Затем математическая теплофизическая модель и метод уточнения ее параметров были опробованы на опытном образце силового модуля бортовой аппаратуры для системы электропитания космического аппарата. Значения параметров модели по результатам измерений на образце модуля отклонялись от измеренных значений в пределах 1.5°C .

В ходе дальнейшей работы планируется разработать и опробовать алгоритмы построения тепловых полей блока бортовой аппаратуры по показаниям встроенных температурных датчиков. Созданные модели и алгоритмы планируется использовать для оперативного анализа поступающих данных от встроенных систем контроля тепловых режимов бортовой аппаратуры космических аппаратов.

В ходе исследований по разработке физико-математических моделей и численных алгоритмов для расчетов распределений ионосферных электрических полей и токов рассмотрены два явления: формирование глобальной электрической цепи и проникновение квазистационарного электрического поля от земной поверхности в ионосферу. Построена модель электрического поля, обеспечивающего ионосферное замыкание глобальной электрической цепи, которая генерируется грозами в атмосфере Земли. Построенная модель впервые позволила предсказать создаваемое атмосферными токами распределение электрического поля в ионосфере, тогда как предшественники смогли дать только оценку его напряженности, на порядок завышенную.

Большой практический интерес представляют ионосферные возмущения, наблюдаемые над областями с высокой сейсмической активностью, в связи с надеждой их использования как предвестников землетрясений. Основанием для такой надежды послужили многочисленные наблюдения возмущений вертикальной компоненты атмосферного электрического поля до и после землетрясений. Но на сегодняшний день известны трехмерные и двумерные модели, в рамках которых показано, что проникающие за счет электропроводности электрические поля практически не могут быть обнаружены спутниковыми измерениями на фоне постоянно существующих ионосферных полей, обусловленных магнитосферными и ионосферными генераторами. В ходе исследований эта точка зрения подтверждена в случае зоны подготовки землетрясения, вытянутой вдоль магнитного меридиана, на который возлагались надежды других авторов по идентификации предвестников землетрясений.

В связи с моделированием неустойчивости токового геомагнитосферного хвоста исследована неустойчивость магнитоплазменной конфигурации магнитного хвоста по отношению к поперечным волновым возмущениям на основе численного магнитогидродинамического моделирования. Использовались модели двух типов: линейная размерности 2.5 и нелинейная трехмерная модель. Начальное равновесное состояние задавалось в соответствии с точным решением уравнений Власова-Максвелла для искривленного токового слоя. Расчеты, выполненные с использованием обеих моделей (линейной и нелинейной), показали неустойчивость искривленного токового слоя по отношению к поперечным волновым возмущениям.

Для моделирования трехмерного течения вязкого газа рассмотрена система трехмерных дифференциальных уравнений Навье–Стокса. Построение численного метода осуществлялось лагранжево-эйлеровой аппроксимацией. Транспортные операторы аппроксимировались вдоль траекторий, а эллиптические операторы на каждом временном слое – методом конечных элементов. В этом случае удается построить дискретную задачу с сохранением полной энергии (кинетической + внутренней энергии газа) на каждом временном слое. В качестве численного примера рассмотрена задача образования тороидальных вихрей при выбросе газа из трубы.

Для исследования устойчивости конвективных течений в экспериментальных установках для разделения жидких смесей использованы уравнения Навье–Стокса для несжимаемой жидкости, дополненные уравнениями переноса тепла и массы. Одним из механизмов развития неустойчивости является аномальная термодиффузия (аномальный эффект Соре), при котором тяжелые компоненты накапливаются в нагретой области, т.е. в верхней части экспериментальной установки, что создает потенциально неустойчивую стратификацию.

При исследовании устойчивости конвективного течения в плоском вертикальном слое в основном состоянии жидкость у нагретой границы поднимается вверх, а вблизи холодной границы опускается вниз под действием силы тяжести. При наличии термодиффузии происходит разделение смеси под действием разности температур в горизонтальном направлении, что вместе с конвективным потоком приводит к разделению смеси в вертикальном направлении. Если в верхней части происходит накопление тяжелой компоненты, то течение может стать неустойчивым. Гидродинамическая неустойчивость может также развиваться благодаря образованию вихрей на границе встречных потоков в центральной части слоя. Выяснен порог наступления неустойчивости в зависимости от числа Грасгофа.

В 2019 году проведена большая серия численных экспериментов на суперкомпьютере для исследования стохастической динамики ансамбля из нескольких десятков резонансных ионов ртути в интерферирующих полихроматических оптических полях. Математическая модель представляет собой систему мультипликативных стохастических дифференциальных уравнений для искомым координат и скоростей ионных частиц. Цель работы состояла в обосновании нового метода чисто оптического (без использования электростатических и магнитостатических полей) долговременного пленения и глубокого охлаждения ансамбля ионов. Компьютерное моделирование динамики ионных ансамблей показало, что действие оптической сверхрешетки на ионы

может приводить к образованию долгоживущих (метастабильных) квазиплоских ионных кулоновских кристаллов с температурой порядка нескольких мК.

Работы 2019 года в области создания математических моделей транспорта ионов в наноструктурах под действием электрического поля были посвящены разработке математической модели ионной проводимости нанопоры с проводящей поверхностью, а также проведению расчетов и сравнению полученных результатов с экспериментальными данными. Математическое моделирование ионной проводимости осуществляется на основе модели пространственного заряда, которая объединяет двумерные уравнения Навье-Стокса, Нернста-Планка и Пуассона. В итоге построена новая физико-математическая модель ионной проводимости нанопоры с проводящей поверхностью и получено хорошее согласие экспериментальных и расчетных данных. Согласованные расчетные и экспериментальные данные подтверждают гипотезу о нелинейном росте проводимости, обусловленном поляризацией проводящей поверхности поры внешним электрическим полем.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Научные публикации в журналах, индексируемых в российских и международных информационно-аналитических системах научного цитирования

1. Denisenko V.V., Rycroft M.J., Harrison R.G. *Mathematical Simulation of the Ionospheric Electric Field as a Part of the Global Electric Circuit* // *Surv. Geophys.* – 2019. – V. 40, No 1. – P. 1-35. DOI: 10.1007/s10712-018-9499-6
2. Korovinskiy D.B., Divin A.V., Semenov V.S., Erkaev N.V., Ivanov I.B., Kiehas S.A., Markidis S. *The transition from "double-gradient" to ballooning unstable mode in bent magnetotail-like current sheet* // *Physics of Plasmas.* – 2019. – V. 26, No 10. – id.102901. DOI: 10.1063/1.5119096
3. Kubyshkina D., Fossati L., Mustill A.J., Cubillos P.E., Davies M.B., Erkaev N.V., Johnstone C.P., Kislyakova K.G., Lammer H., Lendl M., Odert P. *The Kepler-11 system: evolution of the stellar high-energy emission and initial planetary atmospheric mass fractions* // *Astronomy & Astrophysics.* – 2019. DOI: 10.1051/0004-6361/201936581
4. Krasnov I.V. and Kamenshchikov L.P. *A study of metastable ion Coulomb crystals in an all-optical trap polychromatic – Decay process analysis by using supercomputer simulations* // *The European Physical Journal D.* – 2019. – V. 73, No.10. – Art. 224 (9 pp). DOI: 10.1140/epjd/e2019-100252-5
5. Gerasimov V.S., Ershov A.E., Bikbaev R.G., Rasskazov I.L., Timofeev I.V., Polyutov S.P., Karpov S.V. *Engineering mode hybridization in regular arrays of plasmonic nanoparticles embedded in 1D photonic crystal* // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* – 2019. – V. 224. – P. 303–308. DOI:10.1016/j.jqsrt.2018.11.028
6. Gavriilyuk A.P., Isaev I.L., Gerasimov V.S., Karpov S.V. *Physical principles of the formation of a nanoparticle electric double layer in metal hydrosols* // *Colloid and Polymer Science.* – 2019. DOI:10.1007/s00396-019-04573-8
7. Kostyukov A.S., Ershov A. E., Gerasimov V. S., Filimonov S. A., Rasskazov I. L., Karpov S. V. *Super-efficient laser hyperthermia of malignant cells with core-shell nanoparticles based on alternative plasmonic materials* // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.* – 2019. – V. 236. – Art. 106599 (9 pp). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.106599
8. Ryzhkov I.I., Vyatkin A.S., Medvedeva M.I. *Modelling of electrochemically switchable ion transport in nanoporous membranes with conductive surface* // *Journal of Siberian Federal University: Mathematics & Physics.* – 2019. – V. 12 (5) – P. 579-589. DOI: 10.17516/1997-1397-2019-12-5-579-589

9. Zhang L., Biesheuvel P.M., Ryzhkov I.I. *Theory of ion and water transport in electron-conducting membrane pores with pH-dependent chemical charge* // *Physical Review Applied*. – 2019. – V. 12 (1). – Art. 014039. DOI: 10.1103/PhysRevApplied.12.014039
10. Galand Q., Van Vaerenbergh S., Köhler W., Khlybov O., Lyubimova T., Mialdun A., Ryzhkov I., Shevtsova V., Triller T. *Results of the DCMIX1 experiment on measurement of Soret coefficients in ternary mixtures of hydrocarbons under microgravity conditions on the ISS* // *Journal of Chemical Physics*. – 2019. – V. 151. – Art. 134502. DOI: 10.1063/1.5100595
11. Braibanti M., Artola P.-A., Baaske P., Bataller H., Bazile J.-P., Bou-Ali M.M., Cannell D.S., Carpineti M., Cerbino R., Croccolo F., Diaz J., Donev A., Errarte A., Ezquerro J.M., Frutos-Pastor A., Galand Q., Galliero G., Gaponenko Y., García-Fernández L., Gavalda J., Giavazzi F., Giglio M., Giraudet C., Hoang H., Kufner E., Köhler W., Lapeira E., Laverón-Simavilla A., Legros J.-C., Lizarraga I., Lyubimova T., Mazzoni S., Melville N., Mialdun A., Minster O., Montel F., Molster F.J., Ortiz de Zárate J.M., Rodríguez J., Rousseau B., Ruiz X., Ryzhkov I.I., Schraml M., Shevtsova V., Takacs C.J., Triller T., Van Vaerenbergh S., Vailati A., Verga A., Vermorel R., Vesovic V., Yasnou V., Xu S., Zapf D., Zhang K. *European Space Agency experiments on thermodiffusion of fluid mixtures in space* // *European Physical Journal E*. – 2019. – V. 42 (7) – P. 86. DOI: 10.1140/epje/i2019-11849-0
12. Kozlova S., Mialdun A., Ryzhkov I., Janzen T., Vrabec J., Shevtsova V. *Do ternary liquid mixtures exhibit negative main Fick diffusion coefficients?* // *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2019. – V. 21 (4). – P. 2140–2152. DOI: 10.1039/C8CP06795C
13. Gileva L.V., Karepova E.D., Shaydurov V.V. *The Application of a Special Hermite Finite Element Coupled with Collocation to the Diffusion Equation* // *Lecture Notes in Computer Science*. – 2019. – V. 11386. – P. 48-59. DOI: 10.1007/978-3-030-11539-5_5
14. Shaydurov V., Zhang S., Karepova E. *The Finite Difference Approximation Preserving Conjugate Properties of the Mean-Field Game Equations* // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. – 2019. – V. 40, № 4. – P. 513-524. DOI: 10.1134/S1995080219040140
15. Gileva L.V., Karepova E.D., Shaydurov V.V. *A Combination of a Special Hermite Finite Element with Collocation for a Reaction-Diffusion Type Equation* // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. – 2019. – V. 40, № 4. – P. 459-468. DOI: 10.1134/S1995080219040085
16. Karepova E.D., Kornienko V.S. *The comparison of several approaches to the interpolation of a trajectory of a navigation satellite* // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – 2019. – V. 537. – Art. 22054. DOI: 10.1088/1757-899X/537/2/022054

17. Karepova E.D., Shanko U.V., Derevyanko V.V., Nesterov D.A. Real-time predicting the thermal state of the electronic unit by analyzing trends in the built-in sensors readings // AIP Conference Proceedings. – 2019. – V. 2164. – Art. 120008. DOI: 10.1063/1.5130868
18. Shaydurov V., Zhang S., Kornienko V. Computation of Mean-Field Equilibria with Correlated Stochastic Processes// Lecture Notes in Computer Science. – 2019. – V. 11386. – P. 468-475. DOI: 10.1007/978-3-030-11539-5_54
19. Vasil'ev E.N., Nesterov D.A. Structure of the Current Layer and Modes of Magneto-Gas-Dynamic Interaction with Supersonic Gas Flow // High Temperature. – 2019. – V. 37, № 5. – P. 603-608. DOI: 10.1134/S0018151X19050183
20. Шайдуров В.В., Корнеева А.А. Терморезисторная сеть измерения температуры с небольшим количеством проводов // Журнал Сибирского федерального университета. Техника и технологии. – 2019. – Т. 12, № 3. – С. 284-292. DOI: 10.17516/1999-494X-0136
21. Shaydurov V., Yakubovich M. Semi-Lagrangian Approximation of Conservation Laws of Gas Flow in a Channel with Backward Step // Smart Modeling for Engineering Systems. – 2019. – V. 133. – P. 246-265. DOI: 10.1007/978-3-030-06228-6_21