

УДК 531/534:0.61.3

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МЕХАНИКИ РАН

С Е М И Н А Р Ы

СЕМИНАР ПО ЧИСЛЕННЫМ МЕТОДАМ В ЗАДАЧАХ
ТЕПЛО- И МАССООБМЕНА ПОД РУКОВОДСТВОМ
В.И. ПОЛЕЖАЕВА, Л.А. ЧУДОВА, Г.С. ГЛУШКО¹

Кроме помещаемых ниже кратких аннотаций докладов в этом номере журнала представлены избранные статьи участников семинара, приуроченные к 20-летию его деятельности. Публикуемые работы тематически относятся к четырем основным направлениям. Методическое направление, присутствующее в большинстве представленных работ, связано с развитием методов численного моделирования на основе уравнений Навье – Стокса для несжимаемой жидкости, уравнений конвекции в приближении Обербека – Буссинеска для слабосжимаемых сред, уравнений Навье – Стокса для сжимаемого газа. К методическому направлению относятся разработка математического обеспечения с ориентацией на векторные и параллельные вычисления и создание программных систем, удобных для решения прикладных задач и обучения специалистов. Примыкают к этому направлению работы по развитию полуэмпирических моделей турбулентности и методов теории гидродинамической устойчивости.

Три следующих направления имеют прикладной характер. К техническому направлению относятся работы, в которых изучаются такие вопросы, как тепловые режимы криогенных жидкостей, конвективный теплообмен в проблеме безопасности ядерных реакторов, фильтрация в грунтовых сооружениях при строительстве плотин. К технологическому направлению, привлекающему самое большое внимание участников семинара, относятся работы по математическому и физическому моделированию процессов тепло- и массообмена при выращивании монокристаллов и полупроводниковых структур в земных условиях и в условиях микрогравитации. К последнему направлению относятся работы по моделированию гидродинамических процессов в системах Земли и других планет Солнечной системы (движение турбулентных термиков в атмосфере и водной среде, взрыв метеороида в атмосфере Юпитера).

23.I. 1995. **Н.Г. Бурого.** *Применение МКЭ к расчету течений сред с упругими вязкими и пластическими свойствами.*

Дан обзор эйлерово-лагранжевых конечно-элементных методов для течений деформируемой среды (твердой, жидкой или газовой), используемых в программе АСТРА, и приведены результаты расчетов с упором на технологические задачи, главным образом для твердых тел (процессы штамповки и разрушения).

20.II. 1995. **П. Брунсер.** *Молекулярный экран в следе за спутником: лаборатория по молекулярной эпитаксии на низкой земной орбите.*

В течение первого полета установки с молекулярным экраном за спутником в космосе в феврале 1994 г. были выращены тонкие пленки GaAs. Платформа для получения материалов в космосе сконструирована и изготовлена в космическом центре по вакуумной

¹ Развернутое изложение направлений деятельности этого семинара и более полные аннотации и библиография докладов содержатся в сборнике "Численные методы тепло- и массообмена" под редакцией В.И. Полежаева, Л.А. Чудова, Г.С. Глушко, ИПМ РАН, 1997 433 с.

эпитаксии Хьюстонского Университета с целью оценки возможностей использования очень высокого вакуума и условий микрогравитации. Конкретной целью эксперимента было изучение в деталях процессов, происходящих в установке с молекулярным экраном, и получение тонких пленок полупроводников высокого качества. Представлено описание экспериментальной установки и условий проведения космического эксперимента.

27.IV. 1995. **С.А. Новослов.** *Исследование процесса выращивания кремниевых и германиевых пластин и дисков. Перспективы дальнейших исследований.*

Экспериментально исследован процесс выращивания квазипластин кремния различного диаметра из расплава. В тиглях цилиндрической формы обнаружено возникновение поверхностных течений и интенсивных потоков расплава под воздействием вращения кристалла и тигля. Обнаружено, что монокристаллы, содержащие внутреннее ядро-канал, обусловленное эффектом грани, растут стабильно в направлениях с малыми индексами Мюллера: $\langle 111 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$. При этом в монокристалле проявляется центральная грань $\{111\}$, выходящая на фронт кристаллизации по оси вращения. Определены условия проведения процесса, при которых на фронте кристаллизации практически всегда образуется кристаллографическая грань $\{111\}$. Выполнен анализ влияния теплового поля в расплаве кремния и германия на форму слоев роста и структуру кристалла. Приведены рекомендации по направлениям дальнейших исследований.

27.IV. 1995. **В.Г. Масленников.** *Возможности получения свободных монокристаллических пленок из кремния в условиях невесомости.*

В условиях невесомости, реализуемых на космических аппаратах, можно разделить процесс получения монокристаллических пластин на два этапа: формирование на жестком каркасе жидкой пленки заданной толщины с двумя свободными поверхностями и ее последующую кристаллизацию от затравки с поверхностями ориентации $\langle 111 \rangle$. Заданная ориентация затравки позволит получить пластину с двумя молекулярно-гладкими поверхностями $\langle 111 \rangle$, не требующими последующей механической обработки.

Для получения свободной жидкой пленки предлагается использовать раздвижной каркас, изготовленный из смачиваемого расплавом материала. Процесс кристаллизации пленки от затравки предполагается проводить со скоростью не менее 300 мм/мин. Эксперименты по получению свободной пленки из кремния на каркасе были выполнены в условиях невесомости на непилотируемых объектах.

15.V. 1995. **А.З. Мьялдуп.** *Воздействие низкочастотных вибраций на теплоперенос при выращивании кристаллов из жидкой фазы.*

На основе комплексного исследования, сочетающего анализ результатов физического моделирования гидродинамических процессов на низкотемпературных жидкостях и анализ свойств кристаллов иттрий-скандий-галлиевого граната (ИСГГ), выращенных в условиях вибрационного воздействия, показаны особенности вибрационного воздействия кристалла при формировании структуры потоков в объеме расплава и на его поверхности, а также для стабилизации тепловых процессов в подкристалльном слое.

Вибрационное воздействие кристалла на структуру объемного и поверхностного течений при выращивании монокристаллов методом Чохральского в изотермической и неизотермической модельных жидкостях исследовано в диапазонах амплитуд 0,01–1,5 мм и в диапазоне частот 10–200 Гц. Результаты исследования макро- и микронесоднородностей в кристаллах ИСГГ, выращенных методом Чохральского при наложении вибраций, хорошо согласуются с результатами физического моделирования процесса.

5.V. 1995. **В.М. Коваленко.** *Особенности поведения коэффициентов статистически-стационарного турбулентного переноса в дозвуковых потоках в приближении парных корреляций.*

Для определения коэффициентов турбулентного переноса через непосредственно измеряемые характеристики самой турбулентности рассмотрена задача о нахождении связи

коэффициентов переноса и их составляющих с тензором парных корреляций эйлера поля скоростей.

С помощью предложенной модификации самосогласованного подхода, основанного на итерациях уравнения неразрывности, показано, что искомая зависимость реализуется в виде линейного интегрального соотношения на некоторых траекториях в потоке. Найден вид этих траекторий, что принципиально позволяет осуществлять непосредственную экспериментальную проверку рассматриваемого приближения. Исследована связь полученного результата с локальными характеристиками турбулентности потока, в том числе – с временными.

Проведена модельная оценка турбулентного числа Шмидта в центре канала с параллельными стенками. Получено значение, в несколько раз меньшее единицы, что показывает необходимость детальных исследований по моделированию тензора парных корреляций в потоках.

19.V. 1995. **А.А. Горбунов.** *Разностные схемы и расчеты термоакустических движений сжимаемого газа вблизи критической точки.*

Приводится обоснование разностных схем для расчета одно- и двумерных задач при течении сжимаемого газа на основе уравнений Эйлера и Навье – Стокса. Обсуждаются расчеты одно- и двумерных течений в задаче о распаде слабого разрыва вблизи критической точки. Анализируются эффекты отклонения одномерных течений от двумерных. Рассмотрено влияние вязкости в модели Навье – Стокса. Обсуждается применимость результатов к анализу и интерпретации экспериментов на станции "Мир" в условиях невесомости.

3.VII. 1995. **О.А. Бессонов, В.А. Брайловская.** *Численное моделирование трехмерного течения в полости с движущимися крышками с применением параллельной ЭВМ.*

Рассматривается численный метод решения трехмерных уравнений Навье – Стокса для течения несжимаемой вязкой жидкости в регулярной области, а также прямой метод распараллеливания решения для многопроцессорных компьютеров с распределенной памятью. Решение производится методом конечных разностей в переменных завихренности – векторный потенциал с использованием разновидности метода переменных направлений для уравнения переноса завихренности и метода Фурье для уравнения Пуассона для векторного потенциала. Дается описание техники распараллеливания для 2 и 4 процессоров, приводятся данные о достигнутом ускорении и эффективности. Рассматриваются результаты расчетов течения в полости с одной и двумя движущимися крышками для различных геометрий полости и значений числа Рейнольдса. Производится сравнение полученных результатов с работами других авторов.

10.VII. 1995. **Э.В. Теодорович.** *Особенности поведения жидкостей вблизи критической точки.*

В связи с моделированием движения жидкостей вблизи критического состояния необходимо знать поведение ее характеристик в этой области. Рассматривается зависимость параметров плотности, восприимчивости (сжимаемости), теплоемкости и др. от температуры и внешнего поля (давления). Все эти зависимости вблизи критической точки носят степенной характер, а показатели степенного поведения (критические индексы) являются универсальными. Кратко обсуждается, в какой мере описание движения на основе уравнений Навье – Стокса совместимо со спецификой термодинамического поведения жидкостей вблизи критической точки.

27.XII. 1995. **В.Л. Грязнов.** *Численное моделирование задач теплообмена при разработке двигателей внутреннего сгорания.*

Дано краткое описание подхода, развиваемого автором для "автоматического" численного моделирования типичных инженерных задач. Подход включает создание библиотек (баз данных) с информацией об основных геометрических структурах, параметрах расчетов, обработки результатов и т.п. Для решения 3D-задач в областях сложной формы с движущимися границами использованы коммерческие пакеты FIRE и STAR-CD. Приводятся примеры расчетов (течение газа в 2-тактном и 4-тактном двигателе, в системе охлаждения).

15.1. 1996. **Л.Л. Зворыкин, М.В. Тимошенко.** *Электрогидродинамическая устойчивость плоского течения струи в спутном потоке.*

Анализируются возможные причины возникновения неустойчивости втекающей струйки в разделительной камере свободнопроточной электрофоретической установки. Предлагается модификация системы уравнений электрогидродинамики, позволяющая смоделировать основные характеристики этого явления. Выделены два механизма возникновения растущих возмущений в рассматриваемых системах – гидродинамический и электрогидродинамический Абрагама. В пределе малых возмущений аналитически построены критерии устойчивости и получены выражения для скорости роста неустойчивых мод. Важным моментом работы является использование предположения о возможности существования вихревой электрогидродинамической неустойчивости в слабопроводящих жидких средах.

22.1. 1996. **О.А. Бессонов, В.А. Брайловская.** *Решение трехмерных нестационарных уравнений Навье – Стокса в приближении Буссинеска для моделирования конвективных течений в регулярной области.*

Рассматривается эффективный метод численного решения уравнений Навье – Стокса в приближении Буссинеска для несжимаемой вязкой жидкости в прямоугольном параллелепипеде. Решение производится методом конечных разностей на разнесенных сетках с использованием принципа контрольных объемов. Уравнения в переменных завихренность – векторный потенциал – температура и концентрация решаются отдельно, с применением неявного метода переменных направлений для уравнений переноса и метода Фурье для уравнения векторного потенциала. Для решения уравнения переноса завихренности разработана специальная векторная факторизация. Для дискретизации конвективных членов применена невязкая схема с разностями против потока повышенного порядка точности.

Приводятся результаты тестирования на двух задачах: течение в полости с движущейся крышкой для значений числа Рейнольдса от 400 до 3200 и гравитационная конвекция в кубе с подогревом сбоку для значений числа Рэлея от 10^4 до $8,5 \cdot 10^6$. Получено хорошее совпадение с результатами других авторов. Рассматриваются предварительные результаты расчетов температурного и концентрационного расслоения в вытянутой полости.

25.1. 1996. **Г.Л. Васильцов.** *Использование колокационной расчетной сетки и схем аппроксимации повышенного порядка точности в SIMPLE-алгоритмах.*

Обсуждается повышение точности численного решения уравнений переноса при больших сеточных числах Рейнольдса. Рассматривается применение монотонных TVD-аппроксимаций для решения обобщенного уравнения конвекции и диффузии. Предлагается вариант SIMPLE-алгоритма для решения двумерных уравнений Навье – Стокса на криволинейных неортогональных колокационных расчетных сетках и способ коррекции скорости и давления. Приведены примеры расчетов.

27.1. 1996. **О.А. Бессонов.** *Применение современных высокопроизводительных ЭВМ для решения больших трехмерных задач механики жидкости.*

Рассматриваются вопросы, связанные с оптимизацией больших задач гидромеханики для современных ЭВМ. Особое внимание уделяется рассмотрению рабочих станций, построенных на суперскалярных RISC-микропроцессорах с использованием многоуровневой оперативной памяти. Приводится сравнительный анализ и результаты тестирования ряда рабочих станций, многопроцессорных ЭВМ и персональных компьютеров. Рассматриваются некоторые вопросы распараллеливания и приводятся результаты тестирования параллельных ЭВМ. Дается описание техники оптимизации большого конечно-разностного кода для решения нестационарных трехмерных уравнений Навье – Стокса в приближении Буссинеска. Производится сравнение высокопроизводительных ЭВМ различных классов на задачах такого типа.

29.1. 1996. **С.А. Иваненко.** *Применение адаптивных гармонических сеток в гидродинамических расчетах.*

Гармонические отображения поверхностей использованы для генерации адаптивных сеток и уточнения решений задач гидродинамики с внутренними пограничными слоями.

23.IX. 1996. **Н.В. Никитин**. *Об организованных структурах в пристенных турбулентных течениях.*

В 50-х годах было обнаружено, что в турбулентных течениях вдоль гладких стенок присутствуют организованные структуры в виде чередующихся в боковом направлении полос ускоренного и замедленного движения. В дальнейших экспериментах установлено, что с наличием этих структур связана преобладающая доля производства энергии пульсационного движения. Описаны характеристики пристенных структур, полученные прямым численным моделированием течений несжимаемой жидкости в трубах и каналах. Будет представлена качественная теория образования полос, объясняющая цепочку их возникновения, разрушения и восстановления.

2.X. 1996. **А.И. Федосеев, Дж.И.Д. Александер**. *Обратный метод конечных элементов применительно к задачам роста кристаллов из расплавов чистых и бинарных материалов.*

Представлена формулировка метода для математического моделирования задач кристаллизации на основе обратного метода конечных элементов. Алгоритм, предложенный Александром в 1989 г., существенно переработан и расширен до концепции универсального метода с учетом граничных условий общего вида, реальной геометрии, включающей кристалл, расплав, ампулу, а также температурных режимов космических экспериментов. Наряду с нестационарной тепловой задачей, учитывающей процессы фазового перехода на фронте кристаллизации сложной формы, рассматривается распределение концентрации примесей в расплаве и кристалле. Представлены результаты численных экспериментов, включающие моделирование для USML-1,2.

14.X. 1996. **М.К. Ермаков**. *Математическое моделирование теплообмена сверхкритической жидкости на основе уравнений Навье – Стокса.*

В качестве математической модели теплообмена сверхкритической жидкости (жидкость вблизи ее критической точки при температуре выше критической) используются уравнения Навье – Стокса вязкого сжимаемого теплопроводного газа с уравнением состояния Ван-дер-Ваальса. Для моделирования 1D- и 2D-течений сверхкритической жидкости используется алгоритм типа SIMPLER. Для 2D-уравнений используется модификация уравнений с фильтрацией акустических волн.

Приводятся результаты исследования релаксации неоднородностей плотности и задачи о подогреве боковой стенки квадратной полости.

28.X. 1996. **В.И. Полежаев, О.А. Бессонов, С.А. Никитин**. *Концентрационные неоднородности, обусловленные конвекцией в условиях микрогравитации: влияние пространственных эффектов и нестационарности.*

Рассматривается распределение примеси, обусловленное тепловой гравитационной конвекцией в горизонтальном параллелепипеде, ограниченном твердыми стенками с заданными температурами на боковых границах (другие стенки теплоизолированы) при числе Прандтля, равном нулю. На основе численного решения трехмерных нестационарных уравнений Навье – Стокса в приближении Буссинеска исследуется пространственная структура концентрационных неоднородностей, обусловленных тепловой гравитационной конвекцией при различных числах Грасгофа, и относительных ширинах слоя W/H для удлинения $L/H = 20$ в предельном случае $Pr = 0$.

В двумерном приближении показано влияние на распределение примеси изменения микроускорений, измеренного с помощью системы SAMS.

28.X. 1996. **О.А. Бессонов, В.И. Полежаев, В.А. Брайловская**. *Пространственные эффекты конвекции в расплавах при различных числах Грасгофа: концентрационные неоднородности, возникновение несимметрии и колебания.*

Дается определение пространственных характеристик и рассматривается распределение примеси, обусловленное конвекцией в горизонтальном параллелепипеде, ограниченном твердыми стенками с заданными температурами на боковых границах (другие стенки теплоизолированы). На основе численного решения трехмерных нестационарных уравнений

Навье – Стокса в приближении Буссинеска исследуется пространственная структура течения и концентрационные неоднородности при различных числах Грасгофа и относительной ширине слоя при $W/H = 2$, удлинении $L/H = 4$, $Pr = 0,014$, $Sc = 10$. Определены значения чисел Грасгофа, при которых нарушается симметрия поперечного течения, а также возникают колебания, обусловленные тепловой гравитационной конвекцией. Грант № 94-01-01551.

4.XI. 1996. **С.В. Утюжников.** *Численное исследование течений газа, иницированных сверхзвуковым движением тел в атмосфере.*

Представлена реализация метода глобальных итераций для решения полных уравнений вязкого ударного слоя в двумерной и трехмерной постановках. Исследуется корректность метода. Представлена компактная симметричная схема четвертого порядка точности для интегрирования уравнений гиперболического типа. Приводится модификация компактной схемы Толстых, обеспечивающая консервативность схемы при интегрировании смешанной (начально-краевой) задачи. Рассматриваются реализация и приложения одного подхода к построению адаптивных сеток. С помощью рассмотренных численных алгоритмов исследуется ряд нестационарных задач, связанных с входом метеороидов в атмосферу: подъем турбулентного термика, крупномасштабные пожары, взрыв метеороида в атмосфере планеты (на примере кометы Шумейкера – Леви). Решена задача о пролете тела через крупномасштабный термик.

23.XI. 1996. **В.А. Гаранжа.** *Применение консервативных ориентированных Падэ-аппроксимаций для численного моделирования течений несжимаемой жидкости.*

Рассматривается применение ориентированных Падэ-аппроксимаций высокого порядка в качестве базовой техники в построении интегроинтерполяционной схемы аппроксимации (метода конечных объемов) для систем законов сохранения. Предложенный метод использовался для построения дискретизации уравнений Навье – Стокса несжимаемой жидкости в естественных переменных. Показано, что на криволинейных блочно-структурированных сетках предложенный подход обеспечивает дискретную консервативность, ошибку аппроксимации четвертого порядка и свойство геометрической консервативности. Был проведен ряд методических расчетов, в том числе численное моделирование пространственного течения силикона в модели химического реактора с активным смешением. При этом для адекватного разрешения геометрии задачи использовались подвижные (скользящие) сетки.

28.I. 1997. **С.В. Авдеев, А.И. Иванов, А.В. Калмыков, А.А. Горбунов, С.А. Никитин, В.И. Полежаев, А.В. Зюзгин, Г.Ф. Путиц, В.В. Сазонов, В. Zappoli, D. Beysens, Y. Garrabos, T. Frohlich.** *Эксперименты по околокритическим явлениям на станции "Мир" с использованием аппаратуры Alice-1.*

Приводятся сведения о научной программе и данных, полученных в результате совместного российско-французского эксперимента, выполненного на орбитальном комплексе "Мир" 30.09–4.10. 1995 г. на аппаратуре Alice-1, представляющей приборный блок с электронными и оптическими системами управления, контроля и регистрации процессов теплоассопереноса в жидкости, находящейся вблизи критического состояния.

Представлены уточненная привязка по времени программных циклограмм и видеозаписей, данных измерений микроускорений, температур термостата, измерительного и нагревательного термисторов в процессе проведения эксперимента. Приводятся результаты анализа измерений микроускорений на борту станции "Мир" во время проведения экспериментов с использованием трех способов измерений: 1) с помощью встроенного акселерометра этой установки, 2) с помощью американской системы акселерометров SAMS, 3) определение квазистатической компоненты микроускорения по телеметрической информации об ориентации станции.

Дан качественный анализ результатов экспериментов, обсуждаются пути их анализа на основе моделей конвективного теплообмена. Приведены результаты расчета термоакустических волн вблизи критической точки в модели ячейки Alice-1.

Даны примеры расчета гравитационной чувствительности тепловой конвекции в жидких средах со слабой сжимаемостью к квазистатическим составляющим микроускорений. Обсуждаются предложения по дальнейшему развитию исследований, в том числе по наземному использованию аппаратуры Alice-1.