

Научная статья

УДК 532.4;519.63

DOI: 10.17072/1993-0550-2026-2-75-87

<https://elibrary.ru/ncyare>



Исследование соответствия системы уравнений тепловой конвекции в приближении Буссинеска модели течения в микропробирке при проведении ПЦР

Лаврентий Юрьевич Привалов¹, Константин Иванович Михайленко²

^{1, 2} Институт механики имени Р. Р. Мавлютова Уфимского научного центра РАН, Уфа, Россия

¹ lavrenty.privalov@gmail.com

² const@uimech.org

Аннотация. В работе рассматривается конвективное течение в стандартной полипропиленовой микропробирке, используемой при проведении полимеразной цепной реакции. Недавние исследования показывают, что проведение реакции возможно в самой пробирке без использования специализированных устройств поддержания температуры, однако при этом условии в пробирке будет формироваться конвективное течение с широким диапазоном изменения температур. Данная особенность ставит под сомнение адекватность использования приближения Буссинеска из-за возможного значительного изменения теплофизических свойств жидкости в пробирке. В ходе проведения серии вычислительных экспериментов с использованием программного пакета OpenFOAM получены идентичные решения при использовании решателей как основанных на модели Буссинеска, так и использующих уравнение состояния, учитывающее изменение плотности, теплопроводности и вязкости жидкости. При более детальном анализе получено, что решения совпадают даже для незначительных компонент при сингулярном разложении. Сделан вывод о том, что для рассматриваемого процесса использование модели, основанной на приближении Буссинеска, является достаточным.

Ключевые слова: система уравнений тепловой конвекции; приближение Буссинеска; OpenFOAM; микропробирка.

Для цитирования: Привалов Л. Ю., Михайленко К. И. Исследование соответствия системы уравнений тепловой конвекции в приближении Буссинеска модели течения в микропробирке при проведении ПЦР // Вестник Пермского университета. Математика. Механика. Информатика. 2026. № 2(73). С. 75–87. DOI: 10.17072/1993-0550-2026-2-75-87. <https://elibrary.ru/ncyare>.

Статья поступила в редакцию 09.05.2025; одобрена после рецензирования 07.05.2026; принята к публикации 10.06.2026.



© Привалов Л. Ю., Михайленко К. И., 2026

Лицензировано по CC BY 4.0. Чтобы посмотреть копию этой лицензии, посетите <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

Research article

Study of the Correspondence of the Thermal Convection Equations System in the Boussinesq Approximation to the Flow Model in a Microtube During PCR

Lavrentiy Yu. Privalov¹, Constantin I. Mikhailenko²

^{1,2} R. R. Mavlyutov Institute of Mechanics of the Ufa Scientific Center of the Russian Academy of Sciences, Ufa, Russia

¹ lavrenty.privalov@gmail.com

² const@uimech.org

Abstract. This paper addresses convective flow in a standard polypropylene microtube used for polymerase chain reaction. Recent studies show that the reaction can be performed in the tube itself without the use of specialized temperature maintenance devices, however this will result in a convective flow with a wide range of temperature ranges in the tube. This characteristic poses concerns about the suitability of using the Boussinesq approximation because of the possible significant variation of the thermophysical properties of the liquid. In the course of a series of computational experiments using the OpenFOAM software package, identical solutions were obtained using solvers for both the Boussinesq model and the equation of state that takes into account the variation of liquid density, thermal conductivity and viscosity. A closer analysis shows that the solutions match even for insignificant components of the singular value decomposition. It is concluded that the use of a model based on the Boussinesq approximation is sufficient for the given case.

Keywords: *system of thermal convection equations; Boussinesq approximation; OpenFOAM; microtube.*

For citation: Privalov, L. Yu. and Mikhailenko, C. I. (2026), "Study of the Correspondence of the Thermal Convection Equations System in the Boussinesq Approximation to the Flow Model in a Microtube During PCR", *Bulletin of Perm University. Mathematics. Mechanics. Computer Science*, no 2(73), pp. 75–87, DOI: 10.17072/1993-0550-2026-2-75-87, <https://elibrary.ru/ncyare>.

The article was submitted 09.05.2025; approved after reviewing 07.05.2026; accepted for publication 10.06.2026.

Введение

Конвективные течения играют ключевую роль в различных природных и технологических процессах, определяя распределение тепла и массы в атмосфере, океанах и технических системах. Понимание механизмов возникновения и развития конвективных течений имеет фундаментальное значение для прогнозирования климатических изменений, оптимизации систем отопления и охлаждения, перемешивания, а также для решения других прикладных задач.

Изучение явления конвекции подробно описано в классической литературе [1] для конвекции в различных простых и сложных системах, а также особых режимов, возникающих при определенных условиях. При небольших изменениях плотности среды достаточно использования распространенного приближения Буссинеска [2], что позволяет значительно упростить как аналитическую, так и счетную задачу. Однако у всех приближений существуют условия, при которых их решение незначительно отклоняется от истинного, при этом даже при соблюдении этих условий ошибочные значения могут возникнуть у величин, не связанных с ограничениями напрямую, что, например, в работе [3] потребовало внесения дополнительных модификаций в систему уравнений. Согласно [4], приближение Обербека–Буссинеска подразумевает малость изменения температур, вязкостной диссипации, гидростатического давления, а также линейность изменения

плотности и постоянность теплофизических свойств. Значимость отклонения теплофизических свойств для воздуха приведена в работе [5].

Одной из задач, в которой может быть применено приближение Буссинеска, является задача конвекционной полимеразной цепной реакции (ПЦР) [6]. Классически, конвективная ПЦР подразумевает использование специального оборудования, некоторые из которых описаны в работе [7]. Однако в работе [8] представлен вариант установки с использованием только трех компонентов: микропробирки, нагревательного и охлаждающего элементов. Основной идеей такого подхода является снижение трудоемкости и стоимости ПЦР реакции за счет отказа от сложного специализированного оборудования. По данному направлению проводятся исследования, в числе которых следует отметить постановку численной задачи в программном пакете OpenFOAM, первичная оценка качества сетки [9], и анализ влияния наклона на скорость конвективного течения [10]. В последнем приведенном исследовании сказано, что градиент температур полагается малым, хотя речь идет о перепаде в почти в 100 К на расстоянии меньше сантиметра между нагревательным и охлаждающим элементами. Возвращаясь к [4], [5], можно отметить, что при таком изменении температур изменение теплофизических свойств может быть значительным и нелинейным, так, например, температуропроводность воды изменяется приблизительно на 15%, а ее динамическая вязкость почти в 10 раз.

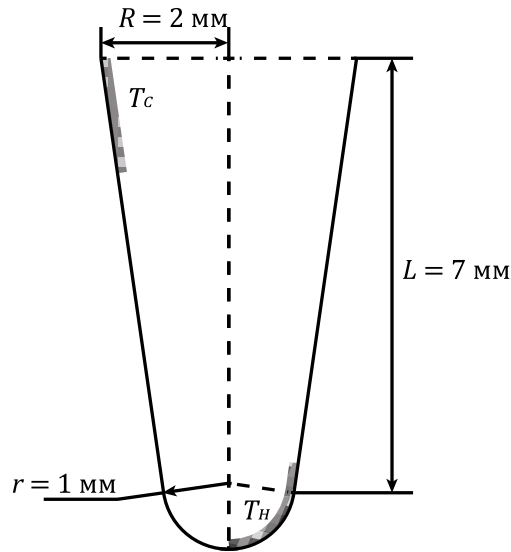
В направлении конвективной ПЦР в микропробирке на данный момент имеется небольшое количество работ. Кроме кинематики течения исследуется также возможность применения реакционной смеси для оценки реакции в работе [11]. При этом в качестве модели движения используется наиболее полное описание течения, что требует значительных затрат вычислительного времени.

В данной работе рассматривается задача численного моделирования конвективного течения жидкости в стандартной полипропиленовой микропробирке, используемой для проведения ПЦР, для оценки влияния погрешности приближения Буссинеска на результат вычислительного эксперимента при учете изменения теплофизических свойств в заданном диапазоне температур. Сравнение производится за счет схожести значимых компонент сингулярного разложения.

1. Постановка общей задачи численного исследования

Используется стандартная полипропиленовая микропробирка 50 мкл, широко применяемая как емкость для проведения реакций на выявление ДНК маркеров [7]. Предполагается использование такой же микропробирки для проведения ускоренной ПЦР реакции при организации подвода тепла снизу, и охлаждения сверху. Такой подход требует минимального оборудования при практически той же или большей эффективности [8]. В работе [9] сетка для моделирования динамики жидкости в микропробирке уже определена, также в работе приведена детальная информация о ее свойствах и качестве (согласно отчету утилиты checkMesh).

Схема расчетной области микропробирки показана на рис. 1. Здесь, как и в ранних работах, за основу берется нижняя треть пробирки, высота сужающейся части которой составляет 7 мм. Сужающаяся часть представляет собой усеченный конус, узкая часть которого плавно переходит в сферическую поверхность. Полагается, что нагрев снизу происходит при температуре $T_H = 375$ К, а охлаждение сверху при температуре $T_C = 280$ К. Важным отличием от предыдущих граничных условий модели является использование границы с условием проскальзывания в верхней части пробирки, так как на практике она представляет собой границу раздела фаз жидкость-воздух (пунктирная линия на рис. 1). Хотя и имеет место явление колебания границы при конвекции [12], для простоты системы этим можно пренебречь. Более того, деформации в сетке конечных объемов нетривиальны.



е

Рис. 1. Схема конструкции микропробирки, используемой для построения сетки конечных объемов

Согласно рекомендациям [13], наилучшей конфигурацией сетки, обеспечивающей качественную сходимость, является сетка, наиболее приближенная к ортогонализированной. Для минимизации искажений была использована методика, включающая размещение кубовидной структуры в центральной части, которая плавно интегрируется с границами области, что представляет собой вариацию подхода с использованием скругленного кубического элемента. Это практически полностью повторяет построение сетки в ранних работах.

На рисунке 2 представлен боковой и горизонтальный срез получившейся сетки пробирки. Так же, как и в [9], конечная сетка состоит из прямых внутренних блоков, состыкованных с искривленными внешними блоками, описывающими границу пробирки. Согласно выводу утилиты оценки сетки checkMesh, коэффициент искажения ячейки не превышает трехкратного в худшем случае.

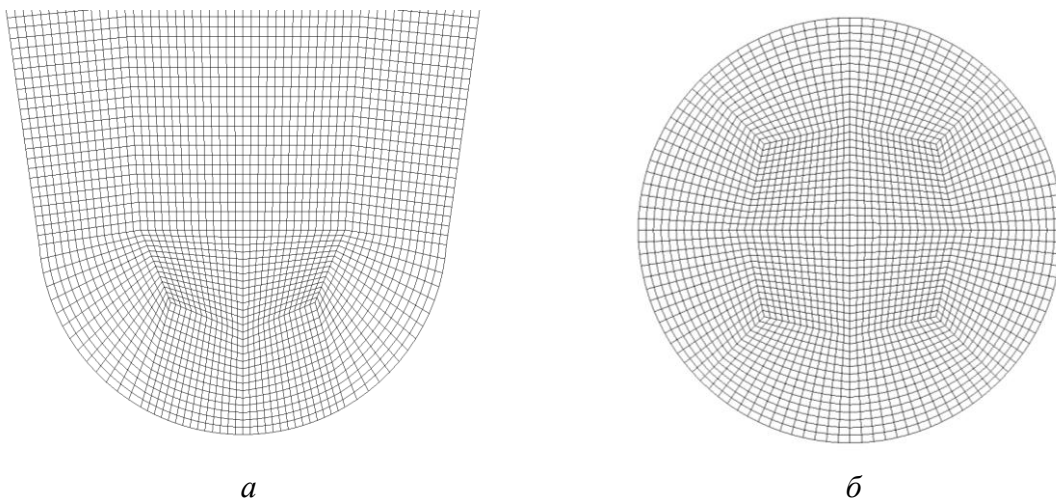


Рис. 2. Боковой срез нижней части (а) и горизонтальный срез верхней части (б) получившейся сетки

Задачей данной работы является сравнение решений задачи конвекции с использованием как общей системы уравнений гидродинамики, так и модели в приближении Буссинеска, принимая во внимание термодинамические свойства среды. Согласно [1], ключевая система уравнений гидродинамики, из которой в дальнейшем получается приближение, определяется следующей системой:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \left(\frac{\eta}{3} + \zeta \right) \nabla \operatorname{div} \mathbf{u} + \rho \mathbf{g}, \quad (1.2)$$

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla s \right) = \kappa \Delta T + D, \quad (1.3)$$

где $\mathbf{u}$ – скорость, p – давление, ρ – плотность, T – абсолютная температура, s – энтропия единицы массы жидкости, $\mathbf{g}$ – ускорение силы тяжести, η и ζ – коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости, κ – коэффициент теплопроводности, D – диссипативная функция.

Система уравнений в приближении Буссинеска, полученной из (1.1)–(1.3) в предположении о малости отклонения плотности от исходного значения, определяется следующей системой:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \beta (T - T_0) \mathbf{g}, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \alpha \nabla^2 T, \quad (2.3)$$

где ν – кинематическая вязкость, β – коэффициент теплового расширения, ρ_0 – эталонная плотность, T_0 – эталонная температура, α – коэффициент температуропроводности.

Программный пакет OpenFOAM включает в себя реализации систем тепловой конвекции со сдвиговой вязкостью μ без учета объемной (в OpenFOAM принято обозначать сдвиговую вязкость через μ , тогда как в классической литературе через η , однако их смысл эквивалентен). На примере системы уравнений гидродинамики уравнение сохранения импульса (1.2) заменяется на более общее:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + (\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot (2\mu \epsilon_{\mathbf{u}}) + \nabla \cdot \left(\frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right) + \rho \mathbf{g}, \quad (3)$$

где $\epsilon_{\mathbf{u}}$ — тензор скоростей деформации. В общем случае уравнение сохранения энергии (1.3) может быть выбрано на основании других свойств среды, при этом для всех реализаций коэффициенты тепло- и температуропроводности выбираются на основании эффективных значений. Так, в данной реализации вместо энтропии была использована энтальпия с температуропроводностью α :

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) + \frac{\partial(\rho K)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} K) - \frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot (\alpha \nabla h) + \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{g}, \quad (4)$$

где $K \equiv |\mathbf{u}|^2/2$, $h \equiv e + p/\rho$, e — удельная энергия. Величины вязкости, теплопроводности, Прандтля и удельной теплоемкости между системами уравнений (1), (2) с учетом

(3) и (4) связаны соотношениями $\alpha = \mu/Pr = \kappa/C_p$. Для системы уравнений приближения Буссинеска положения о значении вязкостей аналогичны указанным выше. Таким образом, при помощи программного пакета OpenFOAM реализуются системы уравнений гидродинамики (1.1), (3), (4) в решателе buoyantPimpleFoam и (2.1), (2.2), (2.3) в решателе buoyantBoussinesqPimpleFoam.

Обе описанные версии моделей используют разные множества параметров, определяющих свойства среды. За рабочую среду в данном случае была принята вода. Очень важно понимать, что помимо плотности среда обладает и другими переменными свойствами, такими как вязкость и теплоемкость. Для наиболее точного задания свойств среды была использована полиномиальная (и, вообще говоря, нелинейная) аппроксимация [14], согласно данным из справочника [15]. В случае же параметров среды для решателя уравнений приближения Буссинеска были взяты постоянные значения, пригодные для достижения наибольшей точности в диапазоне температур около 40–50 °С. Окончательные значения всех необходимых параметров среды представлены в табл. 1.

Таблица 1. Параметры среды для полной системы уравнений теплопроводности и приближения Буссинеска, требуемых в реализации программного пакета OpenFOAM

Приближение Буссинеска	Полная система уравнений
$\nu = 3.9 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$	$C_p(t) = (9850.69t^0 - 48.6714t^1 + 0.13736t^2 - 1.27063 \cdot 10^{-4}t^3) \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$
$\beta = 4 \cdot 10^{-4} \text{ кг}/(\text{м}^3\text{К})$	$\rho(t) = (746.025t^0 + 1.93017t^1 - 0.00365471t^2) \text{ кг} \cdot \text{м}^3$
$T_0 = 350.15 \text{ К}$	$\mu(t) = (0.116947t^0 - 0.00100532t^1 + 2.90283 \cdot 10^{-6}t^2 - 2.80572 \cdot 10^{-9}t^3) \text{ Па} \cdot \text{с}$
$Pr = 2.4$	$\kappa(t) = (-0.710696t^0 + 0.0071857t^1 - 9.29827 \cdot 10^{-6}t^2) \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$

Следует отметить, что условие горячей области пробирки $T_H = 375 \text{ К}$ подразумевает температуру немного большую, чем температура кипения воды, что допускает возможность кипения. Однако данным явлением можно пренебречь. Температура задана лишь на границе области, которая непрерывно омывается холодным потоком, поэтому доля объема при температуре кипения крайне мала. Более того, во время столь небольшого и кратковременного перегрева дистиллированная вода с легкостью может пребывать в метастабильном состоянии без кипения.

Для осуществления численного расчета исходная сетка была разбита на 4 части, содержащие приблизительно равное число ячеек. OpenFOAM позволяет производить вычисления с использованием пространственной декомпозиции расчетной области, когда каждая из подобластей может использоваться отдельным процессом в программной среде MPI, что позволяет добиться ускорения за счет распараллеливания задачи. Данный подход может оказывать небольшое влияние на решение, так как в месте разрыва между подобластями производится слияние решений, однако, для обоих решателей используется одно и то же разбиение, что не оказывает существенного влияния.

При идентичных конфигурациях параллельного запуска вычислительных задач для двух различных решателей – buoyantPimpleFoam для системы уравнений Навье–Стокса и buoyantBoussinesqPimpleFoam для приближения Буссинеска – время завершения расчета различается значительно. Для вычисления одной секунды (при $t \in [11, 12] \text{ с}$) у решателя buoyantPimpleFoam требуется около 250 секунд, тогда как у buoyantBoussinesqPimpleFoam – лишь 150 секунд реального времени, что соответствует ускорению в 1.7 раза.

2. Анализ численного решения

В численном эксперименте проводится расчет до момента времени $t_1 = 25.7$ с, используется шаг по времени $\Delta t_B = 0.002$ с для решателя системы в приближении Буссинеска и $\Delta t_{N-S} = 0.001$ с для полной системы. Далее будет также показано, что шаг по времени Δt_B достаточно мал и дальнейшее измельчение шага по времени не требуется. Результаты расчетов сохраняются с шагом записи каждые 0.1 с. В предыдущих работах [9,10] было отмечено, что к моменту времени 11 с достигается установление, но процесс конвекции не является стационарным, поэтому могут возникнуть колебания.

Наиболее простым способом сравнения полученных решений является оценка одинаковых "стандартных величин". Так, например, максимальные значения модуля скорости для двух рассмотренных моделей очень близки: максимальная скорость $u_{max}^B = 8.5$ см/с в случае приближения Буссинеска; и $u_{max}^{N-S} = 8.2$ см/с для полной системы уравнений. Однако можно оценить одновременно и схожесть решений, и их близость к установившемуся решению, используя сингулярное разложение [15, 16]. Оно позволяет вычислить наиболее существенные сингулярные значения (не "собственные") и сингулярные вектора заданной матрицы. Обычно оно используется для отсека слабых компонент и сохранения значимых (сжатие данных с потерями), а также может показывать преобладание одной или более компонент. Формально, сингулярное разложение определяется равенством

$$M = U\Sigma V^*, \quad (5)$$

где M – исходная матрица произвольного размера, U и V^* – сингулярные матрицы преобразования, Σ – диагональная матрица сингулярных чисел, расположенных в порядке возрастания.

Составляющая U уравнения (5) также является частью метода ортогонального разложения, известного в англоязычной литературе как "Proper Orthogonal Decomposition", которое, например, может быть использовано для анализа турбулентных потоков [17], вихревых токов [18], или даже частотного анализа на предмет наличия выраженных колебаний определенной частоты [19]. В данном случае поток не является турбулентным, так как число Рейнольдса $Re \leq 8$, однако он может иметь колебания за счет конвективного течения.

Для применения метода ортогонального разложения к данной задаче необходимо в качестве матрицы M взять такую, в каждом столбце которой в каждой колонке выписаны все значения всех компонент скоростей во всем объеме (~921 000 значений в рамках данной задачи) для каждого шага по времени в некотором интервале, т.е.:

$$M = |m_{ik}| = |\vec{u}_i^k|, \quad \text{где } \mathbf{u}_j^k = (\vec{u}_{3j+0}^k, \vec{u}_{3j+1}^k, \vec{u}_{3j+2}^k). \quad (6)$$

Компоненты $\vec{u}_j^k$ подразумевают одну из координатных значений x , y или z векторов скоростей на временном шаге k . В общем случае не имеет значения как именно компоненты векторов скоростей распределены в одном столбце. В данном примере каждый вектор скорости занимает по 3 позиции для каждой из своих координат. Иными словами, один столбец представляет собой набор значений $v_{x1}, v_{y1}, v_{z1}, v_{x2}, v_{y2}, v_{z2}, v_{x3}$ и так далее.

Так как полагается, что после 11 секунд течение уже является близким к установившемуся, то можно использовать интервал от 13 с до 25.7 с, при котором число шагов с учетом частоты записи равно 128. Для осуществления ортогонального разложения был

разработан небольшой скрипт, написанный на языке Python, который использует скорости в конечных объемах в заданном диапазоне времен для создания новых векторных полей наиболее значимых компонент из столбцов матрицы U уравнения (3). Матрицы U , Σ и V^* находятся однозначно при помощи встроенной в библиотеку numpy функцию `linalg.svd`. В результате сингулярного разложения – и ортогонального разложения в частности – векторное поле полагаемого стационарного состояния раскладывается на компоненты различной степени значимости подобно дискретному преобразованию Фурье, где самая первая по порядку компонента не изменяется во времени (постоянное среднее значение). В таблице 2 приведены первые четыре сингулярные значения компонент.

Таблица 2. Значимые величины сингулярных чисел диагональной матрицы Σ и их процентные доли при сингулярном разложении всего объема скоростей

k	Приближение Буссинеска		Полная система уравнений	
	$\sqrt{\lambda_k}$	доля, %	$\sqrt{\lambda_k}$	доля, %
1	4.45897668	99.98366386	3.43120718	99.96114623
2	0.00072836	0.01633218	0.00133229	0.03883595
3	0.00000017	0.00003945	0.00000136	0.00003985
4	<0.00000001	0.00000001	<0.00000001	0.00000024

Очевидно, что только первая компонента является значимой. Это говорит о том, что в интервале времени от 13 с до 25.7 с практически отсутствуют изменения или колебания.

Кроме оценки стационарности или наличия особых режимов течения, разложение на компоненты можно использовать для оценки схожести между двумя вариантами решения [18]. На рисунке 3 представлены 6 состояний, по 3 для каждого из решателей, где рисунки 3(а) и 3(б) представляют собой линии тока в исходном поле скоростей на фоне поля температур, а рисунки 3(а1)/3(б1) и 3(а2)/3(б2) – первый и второй компоненты разложения соответственно. Стоит отметить, что первая компонента имеет противоположное направление, которое затем инвертируется правой сингулярной матрицей V^* , но линии тока при этом практически полностью повторяют исходное поле скоростей.

На представленных на рис. 3 линиях тока можно видеть, что нет визуального отличия между решениями, полученными по модели с приближением Буссинеска и с полной системой уравнений, а также, что вторая компонента имеет схожую структуру в обоих случаях.

В эксперименте шаг по времени постановки в приближении Δt_B отличен от шага полной системы Δt_{N-S} . Этому предшествовало то, что Δt_B был подобран на основании получаемого числа Куранта, тогда как Δt_{N-S} был взят с некоторым запасом. Тем не менее, величина $\Delta t_B = 0.002$ с достаточно мала. В этом легко убедиться, если сравнить данное решение с результатом при $\Delta t_B^* = 0.001$ с, используя "слабые" вторые компоненты. На рисунке 4 представлены вторые компоненты сингулярного разложения поля скоростей исходной задачи для Δt_B (а) и с измененным шагом по времени Δt_B^* . Можно видеть, что нет практически никакого визуального отличия между линиями тока при тех же самых начальных позициях этих линий, кроме отдельно взятых малых участков, например, в левом углу пробирки.

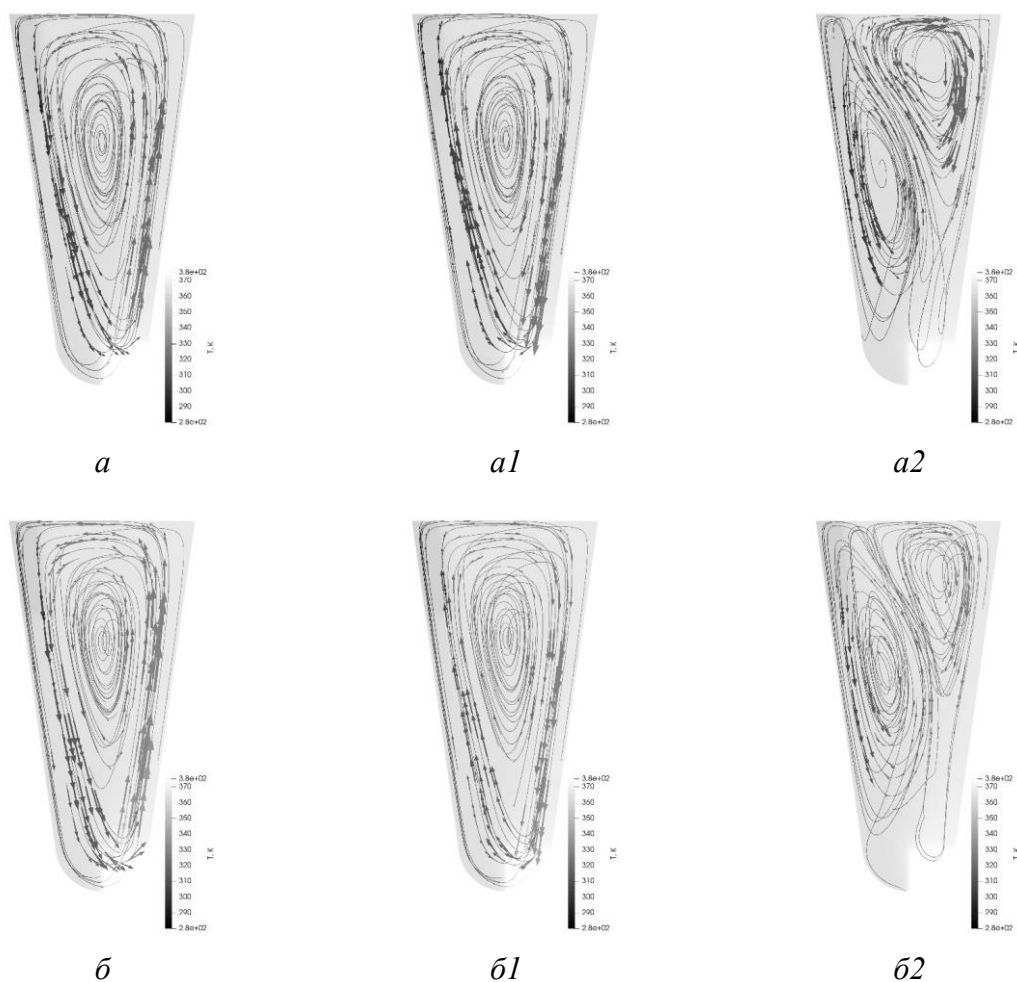


Рис. 3. Линии тока внутри объема микропробирки в исходном поле скоростей, и их 1-ой и 2-ой компоненты сингулярного разложения решения с использованием приближения Буссинеска (а, а1, а2) и полной системы уравнений (б, б1, б2)

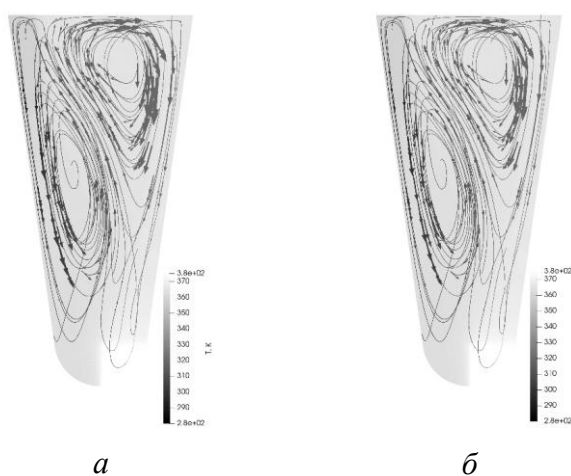


Рис. 4. Линии тока внутри объема микропробирки для второй компоненты скорости при исходном шаге по времени Δt_B (а) и вдвое меньшем шаге Δt_B^* (б)

3. Обсуждение результатов

Основной целью анализа результатов является оценка оправданности использования модели, основанной на приближении Буссинеска вместо полной системы уравнений. Использование модели Буссинеска позволяет как упростить систему уравнений, так и ускорить проведение вычислительного эксперимента так как, во-первых, упрощенная модель требует знания меньшего числа параметров или экспериментальных данных, а во-вторых, расчет занимает меньше времени. Как можно видеть из табл. 1, описание свойств среды для приближения Буссинеска намного проще, так как предполагается, что изменения некоторых из них малы, и могут быть описаны простым линейным соотношением. Но из этого также вытекает дополнительная сложность, связанная с необходимостью сделать дополнительные допущения о некотором среднем (эталонном) значении. Ввиду большого температурного различия между холодной и горячей областью, свойства среды могут изменяться значительно, однако существенные значения температуры будут достигаться лишь в небольшом объеме. Среднее значение температуры, относительно которого заданы свойства среды в приближении Буссинеска, было подобрано на основании предположения, что наиболее "значимая" температура в области будет находиться в диапазоне 40–50 °С, а изменение свойств среды с изменением температуры не более чем линейно.

Результаты расчета показывают, что максимальные модули скоростей практически совпадают при использовании различных подходов. Визуально получаемые потоки неотличимы, вплоть до локальных особенностей. Для окончательного подтверждения схожести поле скоростей было проанализировано при помощи сингулярного разложения с последующим сравнением значимых компонент. Сингулярное разложение позволяет оценить сразу несколько факторов: стационарность получаемого поля скоростей и схожесть сравниваемых решений. Из проведения данного сравнения получено, что, во-первых, в силу преобладания первой – стационарной – компоненты поле скоростей является практически стационарным, и, во-вторых, решения, полученные как при помощи системы уравнений в приближении Буссинеска, так и полной системы уравнений тепловой конвекции, идентичны, в том числе и во второй компоненте, которая является незначительной.

Таким образом, несмотря на значительный температурный перепад в 95 К на расстоянии в несколько миллиметров, система уравнений тепловой конвекции в приближении Буссинеска сохраняет схожесть с полной системой, учитывающей уравнение состояния. Однако, стоит иметь в виду, что рабочей средой в тестовом примере выбрана вода, изменение свойств в рассматриваемом диапазоне температур невелико и их нелинейностью можно пренебречь. В действительности, смесь реагентов может значительно отличаться по свойствам. Таким образом, сделанные выводы могут быть неверны при моделировании динамики существенно не-newтоновских жидкостей.

Заключение

В представленной данной работе проведено сравнение численного решения двух математических моделей тепловой конвекции жидкости в полипропиленовой микропробирке. Указанные модели: полная модель, учитывающая уравнения неразрывности, импульсов, энергии и уравнение состояния; модель на основе приближения Буссинеска, включающая уравнения неразрывности, импульсов и теплопроводности. В обоих случаях решение проводилось на одной и той же конечно-объемной сетке, ранее разработанной для моделирования процессов в микропробирке.

Проведенный анализ результатов моделирования показал практически полную качественную схожесть между результатами, полученными для двух математических моделей процесса. Указанная схожесть определяется не только общей картиной динамики

жидкости, но и значительным совпадением в динамической картине при разложении на значимые компоненты при помощи сингулярного разложения. Кроме того, анализ решения также показал, что на рассматриваемых временах при неизменных внешних параметрах обе модели приводят к установившемуся решению. Также следует отметить, что идентичность сингулярных чисел диагональной матрицы Σ для обеих моделей вплоть до незначимой компоненты подтверждает правильность выбора параметров.

Таким образом показано, что для дальнейшего исследования процессов тепловой конвекции в микропробирке в ходе реакции ПЦР использование математической модели, основанной на приближении Буссинеска, допустимо и обосновано.

Список источников

1. *Гериуни Г. З., Жуховицкий Е. М.* Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
2. *Зубова Н. А., Любимов Д. В., Любимова Т. П.* Слабонадкритические режимы трехмерной конвекции в кубической полости // Вестник ПГУ. Физика. 2011. № 1. С. 21–26.
3. *Винниченко Н. А., Уваров А. В.* Модернизация приближения Обербека–Буссинеска для решения нестационарных задач конвекции в замкнутой полости // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. 2010. № 6. С. 28–32.
4. *Mayeli P., Sheard G. J.* Buoyancy-driven flows beyond the Boussinesq approximation: A brief review // International Communications in Heat and Mass Transfer. 2021. Vol. 125. 105316. DOI:10.1016/j.icheatmasstransfer.2021.105316.
5. *Cimarelli A., Fenzi A., Angeli D., Stalio E.* Assessment of the Oberbeck–Boussinesq approximation for buoyancy-driven turbulence in air // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2025. Vol. 243. P. 126851. DOI:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.126851.
6. *Mullis K. B., Faloona F. A.* Specific Synthesis of DNA in Vitro via a Polymerase_Catalyzed Chain Reaction // Methods in enzymology. 1987. Vol. 155. P. 335–350.
7. *Чемерис Д. А., Гарафутдинов Р. Р., Сахабутдинова А. Р., Малеев Г. В., Чемерис А. В.* Конвекционная ПЦР в конвективных ячейках разных типов // Биомика. 2018. Т. 10(4). С. 410–443. DOI:10.31301/2221-6197.bmcs.2018-52.
8. *Garafutdinov R. R., Chemeris D. A., Sakhabutdinova A. R., Moiseev K. V., Urmancheev S. F., Mikhaylenko K. I., Privalov L. Yu., Chemeris A. V.* Convective polymerase chain reaction in standard microtubes // Analytical Biochemistry. 2022 Vol. 641. P. 114565. DOI: 10.1016/j.ab.2022.114565.
9. *Исламов А. И., Набиуллина К. Р.* Моделирование термоконвекции в микропробирке при точечном нагреве: подготовка вычислительной сетки и выбор методов // Многофазные системы. 2024. Т. 19, № 2. С. 64–72. DOI:10.21662/mfs2024.2.010.
10. *Исламов А. И., Набиуллина К. Р.* Моделирование температурной конвекции в микропробирках при точечном нагреве: зависимость скорости конвекции от угла наклона // Многофазные системы. 2024. Т. 19, № 3. С. 94–102. DOI:10.21662/mfs2024.3.014.
11. *Михайленко К. И., Васильев Т. А., Ахметзянова Л. У.* К вычислительному моделированию химических взаимодействий в условиях температурной микроконвекции // Вестник Башкирского университета. 2024. Т. 29, № 4. С. 230–235. 10.35184/bulletin-bsu2024.4.9.
12. *Самойлова А. Е.* О возникновении конвекции в слое жидкости со свободной поверхностью. Слабонелинейный анализ // Вестник ПГУ. Физика. 2011. №1. С. 3–8.

13. *Mikhaylenko C. I.* Building a finite-difference mesh and selecting a turbulence model for numerical simulations of a vortex tube in OpenFOAM software // *Journal of Physics: Conference Series*. 2020. Vol. 1677. P. 012021. DOI: 10.1088/1742-6596/1677/1/012021.
14. Temperature-Dependent Thermophysical Properties for Pure Water // Tobias Holzmänn & Holzmänn CFD. URL: <https://holzmänn-cfd.com/community/blog-and-tools/cae-blog/thermophysical-properties-water>. (дата обращения: 24.04.2025).
15. VDI e. V. *VDI Heat Atlas*. Springer. 2010. 1551 p. DOI: 10.1007/978-3-540-77877-6.
16. *Trefethen L. N., Bau D.* III Numerical Linear Algebra. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1997. 361 p.
17. *Lumley J. L.* The Proper Orthogonal Decomposition in the Analysis of Turbulent Flows // *Annual Review of Fluid Mechanics*. 1993. Vol. 25. P. 539–575.
18. *Joyner M. L.* Comparison of Two Techniques for Implementing the Proper Orthogonal Decomposition Method in Damage Detection Problems // *Mathematical and Computer Modelling*. 2004. Vol. 40. P. 553–571. DOI:10.1016/j.mcm.2003.10.050.
19. *Zarepour M., Bergstrom D. J., Spiteri R. J.* Identifying dominant flow structures in a bubbling gas-particle fluidized bed using the spectral proper orthogonal decomposition // *Chemical Engineering Science*. 2024. Vol. 293 (2). P. 120048. DOI:10.1016/j.ces.2024.120048

References

1. Gershuni, G. Z. and Zhuhovitskii, E. M. (1972), *Konvektivnaya ustoychivost neszhimaemoy zhidkosti* [Convective stability of incompressible fluid], Moscow, Russia, 392 p.
2. Zybova, N. A., Lyubimov, D. V. and Lyubimova T. P., (2011), "Slabonadkriticheskiye reszhimi tryokhmernoy konvekcii v kubicheskoi polosti", *Bulletin of Perm University. Series: Physics*, no 1, pp. 21–26.
3. Vinnichenko, N.A. and Uvarov, A.V., (2010), "Improvement of Oberbek-Boussinesq approximation for solving unstationary convection problems in a closed cavity", *Moscow University Physics Bulletin*, no 6, pp. 28–32.
4. Mayeli, P. and Sheard, G. J., (2021), "Buoyancy-driven flows beyond the Boussinesq approximation: A brief review", *International Communications in Heat and Mass Transfer*, V. 125, P. 105316.
5. Cimarrelli, A., Fenzi, A., Angeli, D. and Stalio, E., (2025), "Assessment of the Oberbeck–Boussinesq approximation for buoyancy-driven turbulence in air", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, V. 243, P. 126851.
6. Mullis, K. B. and Faloona, F. A., (1987), "Specific Synthesis of DNA in Vitro via a Polymerase_Catalyzed Chain Reaction", *Methods in enzymology*, V. 155. pp. 335–350.
7. Chemeris, D. A., Garafutdinov, R. R., Sakhabutdinova, A. R., Maleev, G. V. and Chemeris, A. V., (2018), "Convection PCR in different types of convective cells", *Biomics*, V.10(4), pp. 410-443.
8. Garafutdinov, R. R., Chemeris, D. A., Sakhabutdinova, A. R., Moiseev, K. V., Urmancheev, S. F., Mikhaylenko, K. I., Privalov, L. Yu. and Chemeris, A. V., (2022), "Convective polymerase chain reaction in standard microtubes", *Analytical Biochemistry*, V. 641, P. 114565.
9. Islamov, A. I. and Nabiullina K. R., (2024), "Modeling of thermoconvection in a microtube under point heating: computational grid preparation and choice of method", *Multiphase systems*, V. 19, no 2, pp. 64–72.

10. Islamov, A. I. and Nabiullina K. R., (2024), "Modeling of temperature convection in microtubes under point heating: dependence of convection velocity on tilt angle", *Multiphase systems*, V. 19, no 3. pp. 94–102.
11. Mikhaylenko, C. I., Vasilev, T. A. and Ahmetzianova, L. U., (2024), "To numerical simulation of chemical interactions during temperature microconvection", *Bulletin of Bashkir University*, V. 29. no 4. pp. 230–235.
12. Samoilova, A. E., (2011), "O vznikenii konvekcii v sloe zhidkosti so svobodnoj poverhnost'yu. Slabonelinejnyj analiz", *Bulletin of Perm University. Series: Physics*, no 1, pp. 3–8.
13. Mikhaylenko, C.I., (2020), "Building a finite-difference mesh and selecting a turbulence model for numerical simulations of a vortex tube in OpenFOAM software", *Journal of Physics: Conference Series*, V. 1677. P. 012021.
14. Temperature-Dependent Thermophysical Properties for Pure Water // Tobias Holzmam & Holzmam CFD. URL: <https://holzmam-cfd.com/community/blog-and-tools/cae-blog/thermophysical-properties-water> (accessed 24.04.2025).
15. VDI e. V., (2010), *VDI Heat Atlas*, 2nd ed., Springer, Dusseldorf, Germany.
16. Lloyd N. Trefethen and David Bau, III, (1997), *Numerical Linear Algebra*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia.
17. Lumley, J. L., (1993), "The Proper Orthogonal Decomposition in the Analysis of Turbulent Flows", *Annual Review of Fluid Mechanics*, V. 25, pp. 539–575.
18. Joyner, M. L., (2004), "Comparison of Two Techniques for Implementing the Proper Orthogonal Decomposition Method in Damage Detection Problems", *Mathematical and Computer Modelling*, V. 40, pp. 553–571.
19. Zarepour, M., Bergstrom, D. J. and Spiteri, R. J., (2024), "Identifying dominant flow structures in a bubbling gas-particle fluidized bed using the spectral proper orthogonal decomposition", *Chemical Engineering Science*, V. 293, P. 120048.

Информация об авторах:

Л. Ю. Привалов – аспирант Института механики имени Р. Р. Мавлютова Уфимского научного центра РАН (450054, Россия, г. Уфа, Проспект Октября, д. 71), AuthorID: 1229668, ORCID: 0000-0002-3555-376X;

К. И. Михайленко – кандидат физико-математических наук, доцент; старший научный сотрудник лаборатории дифференциальных уравнений механики Институт механики имени Р. Р. Мавлютова Уфимского научного центра РАН (450054, Россия, г. Уфа, Проспект Октября, д. 71), AuthorID: 125228, ORCID: 0000-0001-8703-442X, ScopusAuthorID: 57208104708.

Information about the authors:

L. Yu. Privalov – postgraduate of R. R. Mavlyutov Institute of Mechanics of the Ufa Scientific Center of the Russian Academy of Sciences (71 Oktyabrya Avenue, Ufa, Russia, 450054), AuthorID: 1229668, ORCID: 0000-0002-3555-376X;

C. I. Mikhailenko – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associated Professor; Senior Researcher of mechanics differential equations laboratorie of R. R. Mavlyutov Institute of Mechanics of the Ufa Scientific Center of the Russian Academy of Sciences (71 Oktyabrya Avenue, Ufa, Russia, 450054), AuthorID: 125228, ORCID: 0000-0001-8703-442X, ScopusAuthorID: 57208104708.