



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКТИВНОГО ТЕПЛОМАССООБМЕНА НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА

«НАУКА»

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МЕХАНИКИ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКТИВНОГО ТЕПЛОМАССООБМЕНА НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА

Ответственный редактор
академик В. С. АВДУЕВСКИЙ



МОСКВА «НАУКА»
1987

В. И. Полежаев
А. В. Бунэ
Н. А. Верезуб
Г. С. Глушко
В. Л. Грязнов
К. Г. Дубовик
С. А. Никитин
А. И. Простомолотов
А. И. Федосеев
С. Г. Черкасов

Математическое моделирование конвективного тепломассообмена на основе уравнений Навье—Стокса/В. И. Полежаев, А. В. Бунэ, Н. А. Верезуб и др.—М: Наука, 1987

В монографии систематизированы полученные в последние годы результаты изучения процессов конвекции, тепло- и массообмена на основе двумерных нестационарных уравнений Навье—Стокса в приближении Буссинеска. Рассмотрены методы численного решения уравнений Навье—Стокса и ускорения расчетов с помощью конвейерной обработки, методы графической и статистической обработки результатов расчетов. Изложены математические модели и результаты исследований конвекции, тепло- и массообмена для технических, технологических приложений, в геофизической гидродинамике. Приведены сведения о специальном математическом обеспечении, разработанном для решения данного класса задач.

Книга предназначена для специалистов в области механики жидкости и газа, вычислительной гидродинамики, теплофизики, геофизической гидродинамики, а также для студентов старших курсов и аспирантов соответствующих специальностей.

Табл. 19 Ил. 135 Библиогр. 280 назв

Рецензенты:

Д. М. Климов, В. М. Пасконов

ОТ РЕДАКТОРА

Исследования по механике жидкости и газа на основе уравнений Навье—Стокса имеют в нашей стране давние традиции. Начало им положено еще в первой половине 60-х годов в трудах участников семинара НИИ ВЦ МГУ по численным методам аэромеханики, работавшего под руководством Г. И. Петрова, Л. А. Чудова, Г. Ф. Теленина, Г. С. Рослякова¹. Эти работы успешно развивались благодаря значительным достижениям советских ученых в вычислительной математике. Важное значение имели всесоюзные школы-семинары по численным методам в механике вязкой жидкости, которые проводились под руководством Н. Н. Яненко в 1966—1983 гг.

Среди многих рассматривавшихся в то время классов задач гидро- и аэродинамики, решение которых не могло быть получено в рамках теории пограничного слоя или невязкого газа (отрывные течения, взаимодействие ударной волны и пограничного слоя, структура ударной волны и т. д.), в работах В. И. Полежаева было значительно продвинуто изучение естественно-конвективных процессов. Эффективные численные методы и программы, разработанные для этого класса задач, позволили уже на ЭВМ второго поколения решить многие практически важные задачи (изучение эффективности тепловой изоляции, теплообмен и температурное расслоение при хранении жидкости в сосудах, конвекция в глубокой атмосфере для интерпретации данных зондирования атмосферы Венеры, исследование гидромеханики невесомости и анализ результатов технологических экспериментов в космосе), а также исследовать структуру нелинейных конвективных течений.

В предлагаемой читателю коллективной монографии изложены результаты следующего этапа исследований упомянутого класса задач, которые получены в течение примерно десяти лет в лаборатории численного моделирования в гидродинамике Института проблем механики АН СССР В. И. Полежаевым и его

¹ См. серию трудов НИИ ВЦ МГУ «Некоторые применения метода сеток в газовой динамике», 1971—1975 гг

сотрудниками. Этот этап связан с освоением ЭВМ следующих поколений, в том числе ЭВМ с конвейерной обработкой, а также с дальнейшим усовершенствованием и расширением круга применяемых численных методов и разработкой специального математического обеспечения. Это дало возможность не только расширить класс решаемых задач, но и существенно приблизить диапазон определяющих критериев подобия к тому, который имеет место в реальных технических, технологических и природных процессах.

В книге изложены оригинальные результаты, полученные ее авторами на всех этапах математического моделирования конвекции и тепломассообмена на основе нестационарных уравнений Навье—Стокса, включая методы их численного решения и ускорения расчетов, а также методы графической и статистической обработки, и подробно рассмотрено применение всей этой сложной техники к физическим задачам, которые, как правило, не могут быть решены какими-либо другими средствами. Завершенность математического аппарата и методическая направленность книги делают ее чрезвычайно полезной для тех специалистов, которые начинают трудный путь освоения и применения в своей практической деятельности методов математического моделирования на основе уравнений Навье—Стокса.

К настоящему времени становится все более ясным, что все проблемы, возникающие в аэро- и гидродинамике при численном решении уравнений Навье—Стокса, вряд ли будут решены даже при использовании разрабатываемых сегодня ЭВМ пятого поколения с десятками и даже сотнями миллиардов операций в секунду. Поэтому в связи со всевозрастающим применением ЭВМ при решении научно-технических задач важно обеспечить как можно большую научную и практическую «жатву». Это возможно лишь при условии глубокого проникновения методов математического моделирования в ту или иную предметную область. Данная книга представляет в этом отношении хороший пример.

Задачи конвекции в замкнутых плоских областях и сосудах, которые были исторически первыми для моделирования на основе уравнений Навье—Стокса, стали уже классическими. Для этого класса задач (или для так называемых моделей общего назначения) авторами установлены фундаментальные закономерности, к числу которых относится эффект максимума температурного (концентрационного) расслоения. В книге приводят-

ся многочисленные примеры расчета многовихревых (или, как теперь говорят, самоорганизованных) структур, возникающих после потери устойчивости равновесия или конвективного движения, включая первые попытки прямого численного моделирования переходных и турбулентных режимов конвекции.

Из рассмотренных в книге новых физических задач, изученных с помощью разработанных методов, обращают на себя внимание задачи о локальных естественно-конвективных процессах в стратифицированной жидкости, а также задачи о конвективном тепло- и массообмене при выращивании кристаллов. Визуализация конвективных процессов, выявление тех их свойств, которые могут быть причиной дефектов в кристаллах, и многопараметрические численные исследования позволяют сделать более целенаправленным поиск путей улучшения характеристик кристаллов и в дальнейшем управлять получением кристаллов с заданными структурой и свойствами. Большое значение для народного хозяйства приобретают методы гидродинамики и при разработке технологий получения новых материалов.

Благодаря достигнутому в работе авторов высокому уровню исследований открываются перспективы широкого применения методологии и конкретных физических результатов в рассматриваемых направлениях, а также пути более эффективного применения методов математического моделирования с использованием современной вычислительной техники — от супер-ЭВМ до персональных мини-ЭВМ в различных предметных областях.

B. C. Авдуевский

ПРЕДИСЛОВИЕ

Развитие механики жидкости и газа и ее приложений в последние годы связано с применением общих математических моделей, основанных на уравнениях Навье—Стокса. Эти уравнения, выведенные более 150 лет назад, еще в середине XIX в., в общем виде мало изучены и содержат огромный запас информации. Их частными случаями являются классические уравнения идеальной (невязкой) жидкости и уравнения пограничного слоя. Следствием исходных уравнений Навье—Стокса являются также уравнения акустики, внутренних волн, теории устойчивости и осредненные уравнения турбулентного движения (уравнения Рейнольдса). Однако все упомянутые уравнения, многие из которых имеют достаточно сложный характер, не обнаруживают всего богатства физических эффектов, присущих исходным уравнениям Навье—Стокса. Ввиду специфической нелинейности последних, наличия малого параметра при старшей производной в сочетании с пространственным характером движения и нестационарностью их можно изучать, по-видимому, лишь с помощью численных методов. Принципиальное значение имеет возможность прямого численного моделирования турбулентных режимов движения жидкости на основе нестационарных уравнений Навье—Стокса.

Вплоть до середины 60-х годов XX в., т. е. до начала широкого распространения ЭВМ и численных методов в гидродинамике, постановка задачи об отыскании сложных и зависящих от большого числа параметров численных решений уравнений Навье—Стокса была непривычной и вызывала дискуссии. В настоящее время численное моделирование на основе уравнений Навье—Стокса сформировалось как самостоятельное направление в механике жидкости и газа, ее приложениях к аэрогидродинамике, машиностроению, энергетике, технологиям, а также к изучению природных явлений. Для многих приложений сегодня требуется все более точный расчет характеристик рабочих процессов при поиске оптимальных конструкторских и технологических решений, направленных на повышение надежности, снижение металлоемкости, энергоемкости конструкций и затрат на их обработку, улучшение эксплуатационных характеристик машин и технологических аппаратов, повышение качества материалов. Наряду с непрерывным ростом производительности ЭВМ и совершенствованием численных методов это создает объективные предпосылки для дальнейшего развития численного моделирования на основе уравнений Навье—Стокса, содержащих значительный «резерв знаний».

Из многих классов задач механики вязкой жидкости, которые изучались на основе уравнений Навье—Стокса, в последние годы заметный прогресс был достигнут в области естественно-конвективного тепло- и массообмена и связанных с ним приложений. Естественной конвекцией называют движения, которые вызываются подъемными силами, обусловленными неоднородностью температуры и (или) состава жидкости или газа в поле силы тяжести. Это гравитационная (тепловая или концентрационная) конвекция. В последнее время термином «естественная конвекция» обозначаются и другие — негравитационные разновидности конвекции, причиной которых являются градиенты сил поверхностного натяжения на границе раздела газ—жидкость или жидкость—жидкость (термокапиллярная или концентрационно-капиллярная конвекция). Указанные механизмы конвекции универсальны и лежат в основе большинства встречающихся в природе движений жидкости или газа, они оказывают существенное влияние на тепловые режимы элементов конструкций, в том числе на эффективность теплоизоляции, однородность и структурное совершенство многих видов материалов, получаемых из жидкой (газовой) фазы, на качество разделения веществ и др.

Физическими особенностями этого класса движений являются сложная внутренняя структура, в которой трудно выделить полограничный слой и «ядро» течения. Существенную роль играет взаимное влияние полей движения, температуры и концентрации при наличии сильной зависимости этих полей от начальных и граничных условий, определяющих критерии подобия и различных осложняющих факторов. Числовые значения основных критериев подобия для задач конвективного теплообмена (чисел Рейнольдса, Рэлея, Марангони) изменяются в природе и технике в широких пределах. Реализация численных решений при значениях этих критериев, соответствующих условиям работы технических и технологических установок, как правило, затруднена.

Важную роль в задачах конвекции играют физические свойства веществ, также изменяющиеся в широком диапазоне, и геометрия, особенности граничных условий. Это приводит к много параметрическому характеру критериальной зависимости искомых характеристик конвективного тепло- и массообмена. Следует отметить, что для практических приложений представляет интерес определение не только традиционных характеристик — средних и местных потоков тепла, необходимых для обеспечения теплового режима элементов конструкций, но и более тонких характеристик, таких, как температурное расслоение (стратификация), а также структура конвекции, приводящих к макро- и микронеоднородностям температурных и концентрационных полей.

Метод математического моделирования, или, как иногда говорят, вычислительный эксперимент, который разрабатывается и систематически применяется в книге для решения упомянутого класса задач, в его наиболее развитой форме слагается из сле-

дующих этапов: 1) выбор физической модели исследуемого явления и определение совокупности определяющих его исходных данных; 2) построение математической модели, т. е. уравнений и краевых условий, в той или иной мере адекватно описывающих это явление; 3) разработка численного метода и алгоритма решения задачи или выбор того или иного известного метода; 4) разработка программы или комплекса программ для решения задачи и обработки результатов на ЭВМ; 5) проведение расчетов, анализ и обработка результатов; 6) практическое применение результатов, включающее сравнение их с данными физического (лабораторного или натурального) эксперимента, позволяющее сделать заключение об адекватности математической модели рассматриваемому реальному физическому явлению и о необходимости той или иной корректировки физической (математической) модели, усовершенствования численного метода или его программной реализации на ЭВМ. Содержание каждого из рассмотренных этапов зависит от класса задач, применяемого математического аппарата и вычислительной техники, требований к полноте и точности описания физического процесса, предъявляемых практикой, и в значительной степени определяется уровнем развития той или иной предметной области.

В механике жидкости и газа математическое моделирование на основе уравнений Навье—Стокса является следующим шагом вслед за моделированием на основе уравнений Эйлера и уравнений пограничного слоя, поэтому естественны высокие требования к эффективности вычислительных методов, быстродействию и памяти ЭВМ и совершенству методов обработки информации, в особенности при моделировании режимов течения, соответствующих потере устойчивости и переходу к турбулентному режиму движения. Очень важным является в этом случае обеспечение непрерывности и в некотором смысле «равнопрочности» упомянутых выше этапов технологической цепочки математического моделирования. Эти обстоятельства в значительной степени влияли как на выполнение излагаемой в книге работы, так и на структуру самой книги.

В книге изложен этап работ, выполненных авторами в течение десяти последних лет в лаборатории численного моделирования в гидродинамике Института проблем механики АН СССР. В методическом отношении книга является развитием и углублением соответствующего раздела книги [122]. В упомянутой книге, предназначенней для первоначального чтения, рассмотрены основы численного моделирования процессов тепло- и массообмена, включая элементы теории метода конечных разностей, модельные задачи, методы решения уравнений пограничного слоя, а также уравнений Навье—Стокса несжимаемой жидкости, и дан исторический обзор развития соответствующих работ.

Глава 1 настоящей книги посвящена изложению методов численного решения двумерных нестационарных уравнений Навье—Стокса (приближение Буссинеска). К этим уравнениям, записан-

ным в переменных вихрь — функция тока, в книге систематически применяется метод конечных разностей (МКР). Рассмотрены различные варианты конечно-разностных схем с раздельным решением нестационарных уравнений типа «переноса» для вихря, температуры и концентрации и стационарного уравнения Пуассона для функции тока. Усовершенствование этого класса схем привело к сокращению времени счета на порядок, а в отдельных случаях на два—три порядка, что эквивалентно переходу на новое поколение ЭВМ. Существенное ускорение расчетов достигается также за счет применения специальных процессоров.

В последние годы для решения уравнений Навье—Стокса все больше применяется метод конечных элементов (МКЭ), позволяющий расширить класс решаемых задач на области сложной геометрии, улучшить аппроксимацию некоторых классов схем, эффективно использовать неравномерные сетки. Этот метод применяется в книге для уравнений Навье—Стокса (приближение Буссинеска), записанных в переменных скорость—давление. Трудности технической реализации МКЭ в настоящее время во многом преодолены, и этот метод начинает все более активно использоваться на ЭВМ серии ЕС. Роль конечно-элементных схем велика и для изучения свойств конечно-разностных схем и их модификаций. Методу конечных элементов принадлежит большое будущее при решении уравнений Навье—Стокса в связи с непрерывным совершенствованием методов решения соответствующих алгебраических систем и увеличением быстродействия ЭВМ. Многочисленные тесты численных методов, включая сопоставления с экспериментальными данными, приводятся в различных главах книги.

Наряду с изложением методов численного решения в книге приведены (см. гл. 2) оригинальные результаты разработки других составляющих математического моделирования (ускорение расчетов с помощью конвейерной обработки, статистическая и графическая обработка численных реализаций), а также конкретные физические результаты.

Результаты физического характера, рассмотренные в гл. 3—5 книги, соответствуют трем основным направлениям приложения теории конвективного тепло- и массообмена: в технике, технологии и геофизике,— где математическое моделирование на основе уравнений Навье—Стокса нашло систематическое применение. К новым физическим результатам относятся:

1) подтверждение и расширение области применения, в том числе в технологических процессах, эффекта максимума температурного и концентрационного расслоения (разд. 3.2, 3.3, 4.2, 4.3);

2) установление различных новых примеров вторичных структур (самоорганизованных структур) для конвекции гравитационного и негравитационного типов, связанных с потерей устойчивости равновесия или конвективного движения (разд. 3.1—3.3, 4.3, 5.1);

3) численная реализация нелинейных колебательных конвективных движений при больших числах Рэлея (разд. 3.1, 3.3, 4.1, 4.3).

Сведения о специальном математическом обеспечении приведены в гл. 6, завершающей книгу.

Несмотря на то что в книге рассмотрены конвективные движения, зависящие только от двух пространственных переменных, выполненная методическая работа и полученные результаты необходимы для уже начавшегося этапа изучения трехмерных конвективных процессов. Из-за ограниченного объема книги в ней не отражены результаты по конвекции и переносу тепла в пористых средах, исследованию тепло- и массообмена в невесомости и некоторым другим техническим приложениям, коротко представлены и результаты численного моделирования турбулентных режимов конвекции на основе уравнений Навье—Стокса [60—64, 89, 128, 131] (см. также [153, 154, 221, 222, 249]).

Книга обобщает материал более 50 оригинальных работ, опубликованных коллективом авторов в 1976—1985 гг. [3, 14, 20—25, 27, 30—32, 36, 50, 55—66, 71—73, 81, 82, 86, 122, 124, 126—128, 130, 131, 133, 140, 143—151, 176, 177, 182—185, 254—256]. Предисловие и глава 1 написаны В. И. Полежаевым, разд. 2.3 и 5.2—А. В. Бунэ, разд. 4.3—Н. А. Верезуб, разд. 2.1, 6.3 и 6.4—Г. С. Глушко, разд. 3.1 и 5.1—В. Л. Грязновым, разд. 3.2—К. Г. Дубовиком, разд. 4.2—С. А. Никитиным, разд. 4.1—А. И. Простомолотовым, разд. 1.2 и 6.2—А. И. Федосеевым, разд. 3.3—С. Г. Черкасовым. Разделы 2.2 и 6.5 написаны совместно А. В. Бунэ, Г. С. Глушко и М. К. Ермаковым, а разд. 6.1—А. В. Бунэ, В. Л. Грязновым и А. И. Простомолотовым.

Следует особо отметить, что важное значение в разработке систем графической визуализации и ускорения расчетов имело сотрудничество авторов монографии с инженерами—специалистами по электронной технике С. Х. Гореликовым и В. А. Салтыковым и специалистами по программному обеспечению ЭВМ М. К. Ермаковым, А. А. Горбуновым и М. Н. Мякшиной.

В заключение авторы считают своим приятным долгом поблагодарить академиков Г. И. Петрова и А. Ю. Ишлинского за внимание к работе, полезные советы и поддержку, профессора Л. А. Чудова за многочисленные обсуждения рассматриваемых в монографии вопросов, Р. Л. Шляго и сотрудников лаборатории вычислительных машин Института проблем механики АН СССР за большую помощь в проведении расчетов.

Авторы выражают также благодарность члену-корреспонденту АН СССР Д. М. Климу и профессору В. М. Пасконову за полезные замечания при рецензировании книги.

Глава 1

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ—СТОКСА

ВВЕДЕНИЕ. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КОНВЕКЦИИ, ТЕПЛО- И МАССООБМЕНА

Численное решение — важнейший этап математического моделирования — состоит из двух главных частей: дискретизации, т. е. способа построения конечномерной модели, представляющей по существу некоторую систему алгебраических уравнений, и метода решения этой системы.

Выбор того или иного конкретного численного метода определяется многими объективными и субъективными факторами, из которых назовем особенности данного класса задач, требования, предъявляемые к численному решению в данной области науки и приложениях (точность, быстрота получения решения, количество вариантов расчета), возможности имеющейся вычислительной техники, а также научные традиции, квалификация разработчиков.

Методам численного решения задач математической физики посвящена обширная литература.

Широко известны достижения в этой области научных школ советских математиков К. И. Бабенко, О. М. Белоцерковского, С. К. Годунова, О. А. Ладыженской, Г. И. Марчука, А. А. Самарского, Н. Н. Яненко. Библиография наиболее близко примыкающих к тематике книги работ отечественной школы вычислительной математики дана в [4, 11, 35, 51, 99, 106, 107, 122, 156, 190]. Переход от простейших математических моделей (модельных задач) к такой специальной системе, составляющей основу теории конвективного тепло- и массообмена, как уравнения Навье—Стокса, требует многих усилий. Этой монографии предшествовал большой самостоятельный этап работ. Его история, ряд первоначальных сведений и промежуточных математических моделей, начиная от элементов теории разностных схем, содержится в книге [122].

Исходной для построения методов численного решения и последующего их применения в данной книге является классическая система двумерных уравнений Навье—Стокса для конвекции, тепло- и массообмена в приближении Буссинеска, которая выводится из общих уравнений Навье—Стокса сжимаемой жидкости в предположении, что жидкость динамически и статически несжимаема, т. е. плотность ее не зависит от давления, но может зависеть от температуры и концентрации примеси.

Предполагается также, что отклонения всех термодинамических параметров от их значений, соответствующих условиям статического равновесия, малы. Модель конвекции жидкости в приближении Буссинеска учитывает эти малые изменения плотности жидкости, происходящие вследствие изменения ее состава и/или температуры, что приводит к ряду новых физических эффектов, отсутствующих в однородной изотермической жидкости (внутренние волны, конвекция, тепло- и массоперенос).

Запишем, следуя [100], уравнения Буссинеска для бинарной смеси, уравнение состояния которой задано в виде

$$\rho = \rho(c, T).$$

Здесь T — температура; c — концентрация примеси; предполагается, что плотность не зависит от давления p . Предположим также, что

$$p = p_0 + p', \quad \rho = \rho_0 + \rho',$$

где p_0 , ρ_0 удовлетворяют уравнению гидростатики

$$\operatorname{grad} p_0 = \rho_0 g,$$

где g — ускорение, создаваемое массовыми силами. Для малых отклонений p' , ρ' имеют место соотношения

$$p' \ll p_0, \quad \rho' \ll \rho_0.$$

Тогда справедливы следующие представления:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} &= \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_0}{\partial y} + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial y} - \frac{1}{\rho_0^2} \frac{\partial \rho_0}{\partial y} \rho' = \\ &= -g + \beta_T g T' + \beta_c g c' + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial y}, \end{aligned}$$

где

$$\beta_T = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p,c}; \quad \beta_c = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial c} \right)_{p,T};$$

$$T' = T - T_0; \quad c' = c - c_0;$$

T_0 , c_0 — некоторые постоянные величины, от которых отчитываются соответственно температура и концентрация, причем $T' \ll T_0$, $c' \ll c_0$.

При выводе исходной системы в уравнениях количества движения плотность всюду, за исключением подъемной силы, считается постоянной. Предполагаются постоянными также коэффициенты вязкости, теплопроводности, удельной теплоемкости, диффузии. При написании уравнений притока тепла и диффузии пренебрегается выделением тепла за счет вязкой диссипации и работы сил сжатия, термо- и бародиффузионными эффектами (см., например, [100]). При этих предположениях уравнения движения, переноса тепла и массы неоднородной жидкости

можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \nabla) \mathbf{V} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p' + v \Delta \mathbf{V} + g(\beta_T T' + \beta_c c'), \\ \operatorname{div} \mathbf{V} &= 0, \\ \rho C_p \left[\frac{\partial T'}{\partial t} + (\mathbf{V} \nabla) T' \right] &= \lambda \Delta T', \quad \frac{\partial c'}{\partial t} + (\mathbf{V} \nabla) c' = D \Delta c'. \end{aligned} \quad (1.1)$$

В этой системе уравнений искомыми являются вектор скорости \mathbf{V} , давление p' , температура T' , концентрация примеси c' (точнее, отклонения последних от их статических значений), которые зависят от пространственных координат и времени t . Параметрами являются плотность, коэффициенты кинематической вязкости $v = \mu/\rho$ (μ — коэффициент динамической вязкости), теплопроводности λ , диффузии D , удельной теплоемкости при постоянном давлении C_p , а также ускорение свободного падения g и коэффициенты теплового и концентрационного изменения плотности β_T и β_c , определенные выше.

Важной особенностью системы (1.1) являются так называемые граничные условия прилипания, в соответствии с которыми все компоненты скорости на твердой неподвижной стенке равны нулю:

$$\mathbf{V}_r = 0. \quad (1.2)$$

В дальнейшем будет часто использоваться модель плоской фиксированной поверхности жидкости, поверхностное натяжение которой зависит от температуры и концентрации: $\sigma = \sigma_0(\beta_{\sigma T} T' + \beta_{\sigma c} c')$. Тогда граничные условия для компонент скорости будут иметь вид

$$V = 0, \quad \mu \frac{\partial U}{\partial n} = \frac{\partial \sigma}{\partial l} = \sigma_0 \left(\beta_{\sigma T} \frac{\partial T'}{\partial l} + \beta_{\sigma c} \frac{\partial c'}{\partial l} \right), \quad (1.3)$$

где n — нормаль, l — касательная к поверхности жидкости.

Граничные условия для полей температуры и концентрации могут быть трех основных типов:

1) задана температура T_r (концентрация примеси c_r) на границе,

2) задан поток тепла $q_r = -\lambda \partial T / \partial n$ (диффузационный поток $j_r = -D \partial c / \partial n$);

3) задан закон теплообмена в виде $q_r = \alpha_r(T_r - T_c)$, где α_r — коэффициент теплоотдачи; T_r — температура стенки; T_c — температура среды (соответственно закон массообмена в виде $j_r = -\alpha_c(c_r - c_c)$, где α_c — коэффициент массообмена). Кроме того, в начальный момент времени должны быть заданы значения всех искомых функций.

Для описания конвекции важной особенностью системы (1.1) является то, что она не содержит так называемых эффектов гидростатической сжимаемости, а также акустических волн, проявляющихся в системе уравнений конвекции сжимаемого газа

при наличии зависимости плотности от давления. Эти эффекты в приближении Буссинеска отфильтрованы благодаря тому, что рассчитываются отклонения давления и температуры (p' , T') от своих статических значений. Это существенно при конструировании вычислительных методов (см., например, [129, 135]). Вместе с тем следует иметь в виду, что при больших перепадах температуры, концентрации примесей или при больших изменениях величины гидростатического давления эти уравнения требуют корректировки.

Между уравнениями (1.1) и уравнениями Навье—Стокса конвекции сжимаемого газа [129] имеются промежуточные математические модели, в которых либо учитывается изменение физических свойств — вязкости, теплопроводности и диффузии в рамках приближения Буссинеска, либо может быть выполнен более полный учет изменения плотности в зависимости от температуры и концентрации. Изложение этих вопросов выходит за рамки данной книги, в которой рассматривается численное решение классической системы уравнений Буссинеска (1.1). Упомянутые классические уравнения конвекции имеют, как показывает практика, весьма широкую область применимости в технике, технологии, геофизике, однако проблемы их численного решения все еще далеки от завершения, поскольку в этих приложениях распространены пространственные (трехмерные) движения и весьма широк диапазон чисел Рейнольдса и других режимных параметров.

Вводя масштабы для искомых величин и независимых переменных, можно привести систему (1.1) к следующему безразмерному виду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \nabla) \mathbf{V} &= -\nabla p + \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{V} + n \left(\frac{Gr}{Re^2} \theta + \frac{Gr_c}{Re^2} C \right), \\ \operatorname{div} \mathbf{V} &= 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} + (\mathbf{V} \nabla) \theta &= \frac{1}{Re Pr} \Delta \theta, \quad \frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{V} \nabla) C = \frac{1}{Re Sc} \Delta C. \end{aligned} \quad (1.4)$$

В этих уравнениях содержатся безразмерные параметры, определенные по величинам, заданным условиями задачи: $Re = V_1 L / v$ — число Рейнольдса, $Gr = g \beta_r L^3 \Delta T / v^2$ — число Грасгофа, $Gr_c = g \beta_c L^3 \Delta c / v^2$ — концентрационное число Грасгофа, $Pr = v / a$ — число Прандтля, $Sc = Pr_d = v / D$ — число Шмидта, или диффузионное число Прандтля, $a = \lambda / \rho C_p$ — коэффициент температуропроводности

Безразмерный аналог граничного условия (1.3) будет иметь вид

$$\frac{\partial U}{\partial n} = \frac{Mn}{Re Pr} \frac{\partial \theta}{\partial l} + \frac{Mn_c}{Re Sc} \frac{\partial C}{\partial l},$$

где $Mn = \sigma_0 \beta_{ot} L \Delta T / \rho v a$, $Mn_c = \sigma_0 \beta_{oc} L \Delta c / \rho v D$ — число Марангони и концентрационное число Марангони, определяющие интенсив-

ность поверхностных механизмов конвекции (термокапиллярной и концентрационно-капиллярной). Система (1.1) или ее безразмерный аналог (1.4) содержат описание широкого круга процессов и различных предельных режимов.

Наиболее простыми являются режимы переноса тепла (массы) молекулярными процессами теплопроводности (диффузии), реализующиеся в неподвижной жидкости ($\mathbf{V} \equiv 0$). Эти режимы являются асимптотическими для системы (1.4) при $Re \rightarrow 0$, $Gr \rightarrow 0$, $Gr_c \rightarrow 0$, $Mn \rightarrow 0$, $Mn_c \rightarrow 0$.

При $Gr = Gr_c = Mn = Mn_c = 0$ уравнения (1.4) представляют уравнения Навье—Стокса однородной несжимаемой жидкости. Два последних уравнения (1.4) в этом случае описывают перенос тепла и массы движущейся жидкостью, при этом процессы тепло- и массообмена не оказывают влияния на движение.

В системе (1.4) содержится описание двух разновидностей естественной гравитационной конвекции: тепловой и концентрационной. Интенсивность тепловой конвекции определяется числом Грасгофа. Существенное значение при этом имеет число Прандтля, представляющее отношение толщин динамического и теплового пограничных слоев. В ряде случаев важную роль играет число Рэлея $Ra = GrPr$.

Интенсивность концентрационной конвекции определяется концентрационным числом Грасгофа, которое является аналогом числа Грасгофа. Важное значение при этом имеет диффузионное число Прандтля (число Шмидта), представляющее отношение толщин динамического и концентрационного пограничных слоев. Аналогом числа Рэлея в режиме концентрационной конвекции является концентрационное число Рэлея.

Число Марангони и концентрационное число Марангони являются аналогами чисел Рэлея и концентрационного числа Рэлея и определяют интенсивность поверхностных механизмов конвекции — термокапиллярной и концентрационно-капиллярной.

При численной реализации существенно, что в процессах естественной конвекции нет характерной скорости, заданной условиями задачи. В качестве масштаба скорости V_1 для системы (1.1) может быть взята, например, величина v/L , имеющая размерность скорости. При этом число Рейнольдса, играющее в системе (1.4) роль масштабного фактора, следует положить равным единице. Безразмерная скорость в системе (1.4) VL/v является в этом случае числом Рейнольдса, отнесенными к местной скорости, а безразмерное время равно vt/L^2 . Ниже используется также безразмерное время $Fo = at/L^2$ (число Фурье).

Искомое решение системы (1.4) в виде поля скорости, температуры и концентрации примеси, которое мы обозначим $\Phi(V, \theta, C)$, определяется при заданной геометрии области γ и совокупности краевых условий γ_0 критериальной зависимостью вида

$$\Phi = \Phi(x, y, z, Fo, Re, Ra, Ra_c, Mn, Mn_c, Pr, Pr_b, \gamma, \gamma_0). \quad (1.5)$$

Это соотношение представляет параметрическую зависимость искомого решения, и его определение является главной задачей моделирования. Равенство (например, в модели и натурных условиях) безразмерных параметров в правой части является, как известно, необходимым и достаточным условием подобия и условием как физического, так и математического моделирования. Найденная в результате моделирования критериальная функция Φ является основой управления процессами конвективного тепло- и массообмена в рамках принятой схематизации процесса.

Отметим также, что введение масштабов при численной реализации можно выполнить различными способами. Например, в геофизической гидродинамике для течений стратифицированной жидкости, к которым относится рассматриваемый класс задач, важную роль играет частота плавучести [168]

$$N = \left(-\frac{g}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^{1/2}.$$

Для рассмотренной выше модели «жидкости Буссинеска» эта частота может быть выражена в виде

$$N = \left(g \beta_T \frac{\partial T}{\partial z} + g \beta_c \frac{\partial c}{\partial z} \right)^{1/2}.$$

При этом масштаб безразмерного времени, соответствующий частоте плавучести, записывается в виде

$$T_N = t_N v / L^2 = (\text{Gr} + \text{Gr}_c)^{-1/2},$$

где $t_N = 1/N$; число Грасгофа и концентрационное число Грасгофа определены по вертикальным масштабам температуры и концентрации:

$$\text{Gr} = \frac{g \beta_T L^4}{v^2} \frac{\partial T}{\partial z}, \quad \text{Gr}_c = \frac{g \beta_c L^4}{v^2} \frac{\partial c}{\partial z}.$$

Комбинация числа Рейнольдса и числа Грасгофа дает число Ричардсона

$$\text{Ri} = g L / V^2 = \text{Gr} / \text{Re}^2 \beta_T \Delta T$$

или число Фруда

$$\text{Fr} = \frac{V}{\sqrt{gL}} = \frac{\text{Re}}{\sqrt{\text{Gr}/\beta_T \Delta T}}.$$

Уравнения Навье—Стокса, составляющие основу уравнений конвекции (1.1), (1.4), обладают рядом специфических особенностей, которые проявляются в численной реализации независимо от формы их записи. Одной из особенностей является пространственно-эллиптический характер решений, обусловленный влиянием вязкости во всем поле течения. В связи с этим для решения требуется использовать типичные для эллиптических уравнений

методы. В отличие от уравнений пограничного слоя при этом требуется постановка граничных условий на всех границах рассматриваемой области.

В системе уравнений Навье—Стокса имеется малый параметр при старшей производной $\varepsilon = 1/Re$, изменению которого соответствует существенное изменение гладкости решения. Это связано с появлением у стенок при росте числа Re пограничного слоя, толщина которого пропорциональна величине $1/\sqrt{Re}$.

Наконец, система уравнений Навье—Стокса нелинейна. Эта нелинейность, типичная для системы гидродинамического типа (подробнее см. [38, 99]), обусловлена в случае несжимаемой жидкости инерционными составляющими в уравнениях количества движения. В сочетании с двумя упоминавшимися выше особенностями нелинейность уравнений Навье—Стокса приводит при достаточно больших числах Рейнольдса к образованию весьма сложных пространственно-временных структур.

При больших числах Re наблюдается неупорядоченное, хаотическое движение жидкости, называемое турбулентным движением, при исследовании которого представляет интерес описание средних пространственно-временных характеристик. Переход из ламинарного режима течения в турбулентный в круглой трубе происходит при числе $Re \approx 2 \cdot 10^3$.

Уравнения конвекции в приближении Буссинеска отличаются своей спецификой ввиду значительного взаимного влияния полей течения и температуры (концентрации). В связи с этим нестационарность течения, обусловленная его неустойчивостью, обнаруживается для такого класса течений при меньших значениях числа Рейнольдса, чем в случае течения изотермической жидкости. Информация об этих режимах содержится в нестационарных уравнениях Навье—Стокса.

До недавнего времени численные исследования при больших Re были связаны лишь с изучением поведения бесконечно малых возмущений на основе линеаризованных гидродинамических уравнений. В последнее время для отдельных классов течений выполнено прямое численное моделирование переходных и турбулентных режимов на основе нестационарных уравнений Навье—Стокса. В этом случае результатом численного решения уравнений Навье—Стокса являются мгновенные значения поля скорости $V(t)$ и других полей, представляющих численные реализации, к которым применяются те же приемы статистической обработки, что и для реализаций, полученных в физическом эксперименте, а именно: находится среднее значение \bar{V} , отклонение от среднего $V' = V - \bar{V}$ и другие статистические характеристики (см. разд. 2.3).

К другим проявлениям нестационарности движения, также описываемого исходной системой уравнений (1.4), относятся внутренние волны в стратифицированной жидкости, которые можно рассматривать в некотором смысле как переходный процесс эволюции начальных возмущений. Наконец, существуют различные

Классы нестационарных движений, связанные с колебаниями массовых сил или изменяющимися во времени тепловыми условиями.

При разработке методов численного решения уравнений типа (1.4) главной задачей было описать с достаточной для практических целей точностью поля искомых величин в широком диапазоне определяющих параметров, в первую очередь чисел Грасгофа, Марангони, включая случаи появления неустойчивостей, вторичных структур, а в отдельных случаях и перехода к турбулентному режиму. С другой стороны, ставилась также задача расчета основных рабочих характеристик процессов тепло- и массообмена в реальном диапазоне технических (технологических) параметров в тех геометрических конфигурациях, которые встречаются на практике. Учитывая трудности этой задачи и необходимость систематического изучения многопараметрических решений типа (1.5), здесь рассматриваются лишь пространственно-двумерные задачи для уравнений (1.4). При этом в зависимости от конкретного численного метода используются различные формы записи исходных уравнений.

1.1. МЕТОД КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ

1.1.1. Общая структура основной конечно-разностной схемы

Для численного решения рассматриваемого класса задач здесь применяется метод дискретизации, обычно именуемый методом сеток. Этот метод является в настоящее время наиболее распространенным методом решения задач тепло- и массообмена [122, 205, 264]. Сущность метода состоит в следующем. В области изменения независимых переменных вводится сетка — дискретная совокупность узловых точек. Вместо функций непрерывного аргумента рассматриваются сеточные функции, значения которых задаются в узловых точках сетки. Дифференциальные уравнения с соответствующими краевыми условиями заменяются приближенными сеточными уравнениями, связывающими значения искомых функций в узлах сетки.

Метод конечных разностей (МКР), применяющийся на сравнительно регулярных сетках и являющийся разновидностью метода сеток, состоит в замене производных, входящих в дифференциальные уравнения, приближающими их конечно-разностными выражениями. Мы будем систематически применять этот метод ниже к уравнениям Навье—Стокса в приближении Буссинеска, записанным в переменных вихрь — функция тока:

$$\omega_t + U\omega_r + V\omega_z = \frac{1}{Re} (\omega_{rr} + 3kr^{-1}\omega_r + \omega_{zz}) + F, \quad (1.6)$$

$$\psi_{rr} - kr^{-1}\psi_r + \psi_{zz} = \omega r^{2k}, \quad (1.7)$$

$$\theta_t + U\theta_r + V\theta_z = \frac{1}{\text{Re} \Pr_D} (\theta_{rr} + kr^{-1}\theta_r + \theta_{zz}), \quad (1.8)$$

$$C_t + UC_r + VC_z = \frac{1}{\text{Re} \Pr_D} (C_{rr} + kr^{-1}C_r + C_{zz}), \quad (1.9)$$

где $k=0, 1$ для плоской и цилиндрической геометрий соответственно;

$$F = \frac{\text{Gr}}{\text{Re}^2} \left(\frac{\partial \theta}{\partial r} \sin \varphi + \frac{\partial \theta}{\partial z} \cos \varphi \right) + \frac{\text{Gr}_c}{\text{Re}^2} \left(\frac{\partial C}{\partial r} \sin \varphi + \frac{\partial C}{\partial z} \cos \varphi \right). \quad (1.10)$$

Функция тока ψ и вихрь ω заданы соотношениями

$$\psi_r = -r^{-k}V, \quad \psi_z = r^{-k}U, \quad \omega = r^{-k}(U_z - V_r). \quad (1.11)$$

Связь вихря с функцией тока в виде (1.7) можно получить, подставляя выражения для скорости через функцию тока в выражение для вихря (1.11). Уравнение для вихря (1.6) получается, если исключить давление из уравнений движения в переменных скорость — давление (1.4) и использовать определение вихря в виде (1.11).

Одной из особенностей системы (1.6) — (1.9) является то, что динамические граничные условия прилипания на твердой границе здесь имеют вид

$$\psi = 0, \quad \partial \psi / \partial n = 0.$$

Таким образом, граничные условия для вихря не заданы, что является одной из особенностей при построении численного метода. Другой особенностью, помимо упоминавшихся выше, является наличие в системе (1.6) — (1.9) стационарного уравнения для функции тока.

В методе конечных разностей для уравнений Навье—Стокса существует большой выбор различных возможностей дискретизации в зависимости от выбора зависимых переменных (скорость — давление или вихрь — функция тока), стационарных или нестационарных режимов. Рассматривая в дальнейшем разностные схемы для нестационарных уравнений в переменных вихрь — функция тока, мы несущественно ограничиваем эти возможности. Разностные схемы даже в этом классе задач различаются в зависимости от следующих основных признаков:

- 1) общая структура схемы: явная, неявная;
- 2) аппроксимация основного оператора, прежде всего аппроксимация конвективных составляющих (односторонние разности, симметричная, консервативные или неконсервативные схемы и т. д.);
- 3) метод решения уравнения Пуассона для функции тока;
- 4) метод аппроксимации граничных условий для вихря;
- 5) метод решения систем разностных уравнений (для неявных схем);

6) структура и способ построения конечно-разностной сетки (равномерная или неравномерная, применение специальных преобразований и т. д.).

В настоящее время существуют и используются для решения уравнений Навье—Стокса несколько десятков разновидностей разностных схем. Поиски наилучших из них, интенсивно продолжающиеся вплоть до настоящего времени, имеют, как правило, эвристический характер и в значительной мере опираются на опыт и прямое сопоставление различных вариантов схем, включая сопоставление с прецизионными экспериментальными данными. Важность тех или иных из перечисленных выше признаков зависит в первую очередь от диапазона чисел Рейнольдса (Рэлея): $Re \leq 1$, $Re \leq 100$, $Re \leq 10^3$.

Для получения численных решений в первом диапазоне выбор указанных признаков не является существенным. В частности, удовлетворительное решение может быть получено и с помощью простейших явных схем для стационарных уравнений на равномерной сетке. Во втором диапазоне перечисленные признаки существенны, хотя не имеют решающего значения. Получение же удовлетворительных решений в диапазоне $Re \approx 10^3$ практически невозможно без усовершенствования разностных схем, аппроксимирующих нестационарные уравнения, оптимизации итерационных процессов, применения неравномерных сеток, специальных способов аппроксимации граничных условий.

Продолжающееся в последние годы продвижение в задачах вычислительной гидромеханики в область все больших чисел Рейнольдса было связано не только с упоминавшимся усовершенствованием схем, но и с более гибким их приспособлением к особенностям решения, а также с выбором тех из них, которые наиболее эффективны для расчета с помощью специальных процессоров (см. разд. 2.1). В связи с развитием многопроцессорных ЭВМ с изменяемой архитектурой в будущем должна появиться возможность создавать специализированные ЭВМ для решения нестационарных уравнений Навье—Стокса.

Рассматриваемые ниже схемы метода конечных разностей являются теми или иными модификациями так называемой основной схемы [122], главная отличительная особенность которой — раздельное решение на каждом временном слое уравнений вихря (и вообще уравнений «типа переноса», к которым относятся также уравнения для скалярных компонент (1.8), (1.9) и стационарного уравнения для функции тока (1.7)). При таком естественном и экономичном способе, однако, возможно «расогласование» полей вихря и функции тока, что связано с ограничениями величины временного шага. Эти ограничения, как показывает практика расчетов, могут быть существенно уменьшены специальными приемами. В то же время при увеличении числа Рейнольдса (Рэлея) характерный период собственных колебаний гидродинамической системы уменьшается, т. е. на величину временного шага сверху налагаются ограничения, обусловленные

физическими особенностями этого класса задач. Эти соображения, а также возможности представления элементов такой схемы в виде отдельных модулей привели к выбору упомянутой структуры схемы в комплексе программ метода конечных разностей (см. разд. 6.1) и в специализированных комплексах программ (см. разд. 6.7).

Схема, подробно рассмотренная в книге [122] и составляющая основу методики и упомянутого комплекса программ, характеризуется следующими особенностями:

1) применением неравномерной сетки с возможностью сильного сгущения узлов в областях с большими градиентами параметров;

2) монотонной аппроксимацией конвективных членов второго порядка точности;

3) экономичной неявной схемой, позволяющей свести решение двумерных уравнений к последовательному решению одномерных уравнений;

4) усовершенствованным методом расчета граничных условий для вихря скорости на границе;

5) высокой точностью решения уравнения Пуассона, обеспечиваемой либо прямым методом разделения переменных с использованием быстрого преобразования Фурье, либо итерационным методом с оптимальным набором параметров.

Различные модификации, внесенные в эту схему после развернутой публикации в 1981 г. методики и комплекса программ [23], частично отражены в работах [25, 185], а также ниже, в гл. 3—5. Эти модификации направлены на совершенствование следующих основных элементов схемы: численного решения уравнения вихря, уравнения Пуассона для функции тока и связи между вихрем и функцией тока на границе, которые мы последовательно рассмотрим ниже. При изложении п. 1.1.2 предполагается, что читатель знаком с книгой [122].

1.1.2. Сеточные аппроксимации уравнений вихря и переноса

Основная схема. Структуру основной разностной схемы рассмотрим вначале для модельного одномерного уравнения переноса с диссиpацией

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + U(x) \frac{\partial \omega}{\partial x} = \epsilon \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2}.$$

Решение ищется в области $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq t \leq T$ при следующих начальных и граничных условиях:

$$\omega(x, 0) = \omega^0(x), \quad \omega(0, t) = \omega_0(t), \quad \omega(1, t) = \omega_1(t).$$

Область непрерывного изменения аргумента заменим разностной сеткой с координатами x_i, t_n . Введем обозначения

$$f(x_i, t_n) = f_i^n,$$

где $i=0, 1, 2, \dots, N-1$, $n=0, 1, 2, \dots, K$. Узлы пространственной разностной сетки будут располагаться неравномерно. Локальный пространственный шаг сетки определяется разностью между координатами двух соседних узлов

$$h_i = \Delta x_i = x_{i+1} - x_i.$$

Временная разностная сетка вводится в общем виде следующим образом: $\tau_n = t_{n+1} - t_n$. При этом $t_K = \sum_{n=1}^K \tau_n$. На равномерной временной сетке с постоянным шагом τ имеем $t_K = K\tau$.

Обозначим

$$f_{i,j,x} = (f_{i+1,j} - f_{i,j})/h_i,$$

$$f_{i,j,\bar{x}} = (f_{i,j} - f_{i-1,j})/h_{i-1},$$

$$f_{i,t} = (f_{i,j}^{n+1} - f_{i,j}^n)/\tau,$$

$$f_{i,j,x,\bar{x}} = 2(f_{i,j,x} - f_{i,j,\bar{x}})/(h_i + h_{i-1}),$$

$$f_{i,j,x}^{\circ} = 0,5(f_{i,j,x} + f_{i,j,\bar{x}}).$$

Применение для аппроксимации нелинейного конвективного члена $U\partial\omega/\partial x$ разностных выражений, называемых центральными разностями, приводит при малых значениях ε к нарушению монотонности (см. [122]), а использование монотонной аппроксимации односторонними разностями позволяет получить системы алгебраических уравнений, коэффициенты которых удовлетворяют достаточным условиям устойчивости. Такая аппроксимация имеет первый порядок точности и приводит к появлению значительной схемной вязкости, имеющей порядок $v_h \sim Uh/2$.

Некоторым компромиссом является применение известной монотонной аппроксимации А. А. Самарского [156], имеющей при условии $v_h \ll 1$ второй порядок точности. Спецификой ее является то, что нарушение последнего условия в отдельных точках (например, зонах максимума скорости) не приводит к существенной интегральной погрешности, в связи с чем эта аппроксимация находит широкое применение в задачах конвективного теплообмена. Использование этой аппроксимации приводит к следующей схеме:

$$\omega_{i,t} + U\omega_{i,x}^{n+1} - 0,5|U|(\omega_{i,\bar{x}} - \omega_{i,x})^{n+1}\xi_1 = \varepsilon\eta_U\omega_{i,x,\bar{x}}^{n+1}.$$

Здесь

$$\eta_U = 1 / \left(1 + \frac{|U_i^n| h_i}{2\varepsilon} \xi_2 \right).$$

Такая запись обобщает все три указанные выше аппроксимации: при $\xi_1 = \xi_2 = 0$ — симметричная аппроксимация конвективных членов; при $\xi_1 = 1$, $\xi_2 = 0$ — односторонняя аппроксимация первого

порядка точности и при $\xi_1 = \xi_2 = 1$ — аппроксимация А. А. Самарского. Особенностью этой схемы является также «линеаризация» нелинейных конвективных членов, пригодная, вообще говоря, при малых временных шагах τ . Введение в аппроксимацию конвективных членов U^n и $|U^n|$ применяется для того, чтобы сделать схему не зависящей от знака скорости.

Эта схема приводится к каноническому трехдиагональному виду

$$-A_i \omega_{i+1}^{n+1} + B_i \omega_i^{n+1} - C_i \omega_{i-1}^{n+1} = f_i, \quad (1.12)$$

допускающему применение метода прогонки (см. [156]). Коэффициенты в уравнении (1.12) имеют вид

$$A_i = \frac{\tau}{4h_i} \left(\frac{4\epsilon\eta_U}{h_i + h_{i+1}} + |U^n| \xi_1 + U^n \right),$$

$$C_i = \frac{\tau}{4h_i} \left(\frac{4\epsilon\eta_U}{h_i + h_{i+1}} + |U^n| \xi_1 - U^n \right),$$

$$B_i = A_i + C_i + 1, \quad f_i = \omega_i^n.$$

Общая структура схемы для случая двух пространственных переменных может иллюстрироваться на модельном операторном уравнении

$$\partial f / \partial t = (L_1 + L_2) f + F,$$

где L_1 и L_2 — одномерные дифференциальные операторы, действующие по разным направлениям. Решение этого уравнения выполняется по методу переменных направлений [156, 190] в два этапа:

$$\frac{f^{n+\frac{1}{2}} - f^n}{\tau/2} = \tilde{L}_1 f^{n+\frac{1}{2}} + \tilde{L}_2 f^n + \tilde{F}^n,$$

$$\frac{f^{n+1} - f^{n+\frac{1}{2}}}{\tau/2} = \tilde{L}_1 f^{n+\frac{1}{2}} + \tilde{L}_2 f^{n+1} + \tilde{F}^n,$$

где \tilde{L}_1 , \tilde{L}_2 — одномерные разностные операторы. Согласно этой схеме на первом этапе осуществляется решение системы трехдиагональных алгебраических уравнений методом прогонки в одном из направлений, в результате чего находятся значения искомой функции на промежуточном $(n + \frac{1}{2})$ -м временном слое. На втором этапе находится искомое решение на верхнем $(n + 1)$ -м временном слое. Такая схема имеет первый порядок по времени, но стационарное решение (если оно существует) не зависит от величины временного шага.

Дифференциальные уравнения для вихря ω , температуры θ и концентрации C в системе (1.6) — (1.9) имеют сходную структуру, что позволяет записать их в виде некоторого обобщенного

уравнения переноса

$$\frac{\partial f}{\partial t} + U \frac{\partial f}{\partial r} + V \frac{\partial f}{\partial z} = \frac{1}{\text{Ru}} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + A \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \right) + F.$$

В зависимости от того, какая искомая функция рассматривается, параметры Ru и A принимают значения $\text{Ru}=\text{Re}$, RePr , ReSe и $A=3k/r$, k/r , k/r для уравнений вихря, переноса тепла и массы соответственно. При этом правая часть F выражается в виде (1.10) для уравнения вихря и равна нулю при данной формулировке задачи для уравнений переноса тепла и массы соответственно.

Основная разностная схема, применяемая ниже в комплексе программ (см. разд. 6.1) для решения обобщенного двумерного уравнения переноса, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} & \frac{f^{n+\frac{1}{2}} - f^n}{\tau/2} + U f_r^{n+\frac{1}{2}} - 0.5 |U| (f_r - f_r^{n+\frac{1}{2}}) \xi_1 + V f_z^n = \\ & = \frac{1}{\text{Ru}} [\eta_U f_{rr}^{n+\frac{1}{2}} + A f_r^{n+\frac{1}{2}} + f_{zz}^n] + F^n, \\ & \frac{f^{n+1} - f^{n+\frac{1}{2}}}{\tau/2} + U f_r^{n+\frac{1}{2}} + V f_z^{n+\frac{1}{2}} + 0.5 |V| (f_z - f_z^{n+\frac{1}{2}}) \xi_1 = \\ & = \frac{1}{\text{Ru}} [f_{rr}^{n+\frac{1}{2}} + A f_r^{n+\frac{1}{2}} + \eta_V f_{zz}^{n+\frac{1}{2}}] + F^{n+1}, \end{aligned} \quad (1.13)$$

где

$$\eta_\alpha = \frac{1}{\frac{|\alpha| h_i \text{Ru}}{1 + \frac{|\alpha| h_i \text{Ru}}{2}} \xi_2}, \quad \alpha = U, V.$$

В этой разностной схеме, как и в ее одномерном аналоге, имеются параметры ξ_1 и ξ_2 , изменение которых позволяет задавать различные типы аппроксимаций конвективных членов: при $\xi_1 = \xi_2 = 0$ — симметричные разности, $\xi_1 = 1$, $\xi_2 = 0$ — односторонние направленные разности, $\xi_1 = \xi_2 = 1$ — аппроксимация Самарского. Отметим также, что в этой схеме на нижнем слое во времени (n -м для первого этапа и $(n+1/2)$ -м для второго этапа) применяется симметричная аппроксимация. Так же как и в одномерном случае (1.9), здесь используется аппроксимация конвективных членов, усредненная относительно U и $|U|$ (или V и $|V|$), для того чтобы схема не зависела от знака скорости.

Одномерные операторы на нижнем временном слое аппроксимируются симметричными разностями. Оба разностных уравнения (1.13) приводятся к стандартному трехдиагональному виду.

Одним из важных вопросов, возникающих при решении уравнения типа переноса, является вопрос о величине допустимого по устойчивости временного шага τ . Преимуществом неявных схем (1.13) в отличие от явных является отсутствие ограничения на величину τ из условий устойчивости, если их использовать вне

связи с уравнением для функции тока и граничными условиями. При использовании же упомянутых схем в системе уравнений Навье—Стокса возникают ограничения на величину τ , зависящие от точности решения уравнения для функции тока, способа аппроксимации граничного условия для вихря и других факторов. Мы вернемся к этому вопросу ниже и рассмотрим некоторые примеры после завершения описания остальных элементов основной схемы.

Другие варианты неявных конечно-разностных схем. Недостатком изложенной выше конечно-разностной схемы, широко применявшейся в расчетах конвективного тепломассообмена, является то, что она не консервативна, т. е. не удовлетворяет законам сохранения. В том случае, когда имеются разрывы в начальных условиях или когда решение не является гладким (в частности, при расчетах на грубых сетках в области больших чисел Рейнольдса), применение этого типа схем может приводить к неверным результатам, поэтому для расчета в этих задачах необходима модификация основной схемы. Одной из таких схем, используемых в практике расчетов, является неявная консервативная схема, имеющая вид

$$\begin{aligned} \frac{f^{n+\frac{1}{2}} - f^n}{\tau/2} + (Uf)_{\frac{r}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + (Vf)_{\frac{z}{2}}^n &= \frac{1}{R_u} [f_{rr}^{n+\frac{1}{2}} + f_{zz}^n] + F^n, \\ \frac{f^{n+1} - f^{n+\frac{1}{2}}}{\tau/2} + (Uf)_{\frac{r}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + (Vf)_{\frac{z}{2}}^{n+1} &= \frac{1}{R_u} [f_{rr}^{n+\frac{1}{2}} + f_{zz}^{n+1}] + F^n. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Важным свойством этой схемы является так называемая энергетическая нейтральность [191], заключающаяся в том, что эта схема сохраняет кинетическую энергию системы.

В связи с проблемой расчета негладких решений уравнений Навье—Стокса следует отметить, что при корректной постановке краевой задачи и применении подробной сетки, удовлетворяющей условию $Re_h < 1$, решения этих уравнений должны обладать определенной гладкостью. Однако практически так бывает далеко не всегда, в особенности для уравнений переноса тепла и массы. Поэтому оказываются полезными комбинированные варианты основной схемы в виде (1.13) и консервативной схемы. Один из вариантов такой схемы с введением сетки с полуцелыми пространственными шагами, предложенный в работе [185], применяется ниже (в разд. 3.3) для решения задач конвекции при наличии разрывов в начальных условиях (ступенчатый подвод тепла).

Явные схемы. В связи с применением специальных процессоров с конвейерной обработкой данных возрождается интерес к явным схемам для уравнения переноса. Это связано с тем, что ускорение расчетов, достигаемое при использовании таких процессоров (см. разд. 2.1), существенно зависит от длины обрабатываемого ряда чисел, а в явной схеме весь массив данных можно в принципе рассматривать в виде такого единого ряда чисел,

что существенно (в некоторых случаях на порядок) повышает скорость расчета.

Явный вариант основной схемы легко получить из уравнений (1.13), считая, что имеется один слой по времени t^n , к которому отнесены все разностные операторы. Таким образом, эта схема записывается в виде

$$\begin{aligned} \frac{f^{n+1} - f^n}{\tau} + U f_r^n - 0,5 |U| (f_r^n - f_r^-) \xi_1 + V f_z^n - 0,5 |V| (f_z^n - f_z^-) \xi_1 = \\ = \frac{1}{R_u} (\eta_U f_{rr}^- + A f_r^- + \eta_V f_{zz}^-)^n. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Здесь, как и в неявном варианте основной схемы, параметрам $\xi_1 = \xi_2 = 0$ соответствуют аппроксимации симметричными разностями, $\xi_1 = 1, \xi_2 = 0$ — односторонними разностями, а $\xi_1 = \xi_2 = 1$ — монотонная аппроксимация Самарского. Недостаток этой схемы, как и ее неявного аналога, — отсутствие консервативности, что проявляется на существенно негладких решениях при наличии разрывов в начальных или граничных условиях.

Из класса явных схем в расчетах конвективного тепло- и массообмена, осуществляемых с применением конвейерной обработки, эффективной оказывается известная явная консервативная схема, предложенная в работе Аракавы [191], имеющая вид

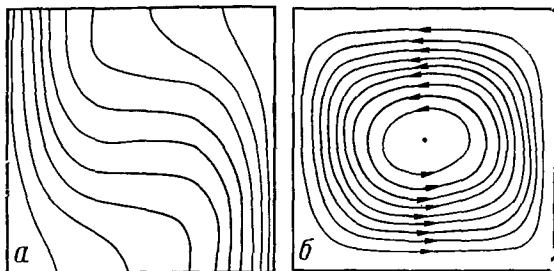
$$\begin{aligned} (\omega^{n+1} - \omega^n)/\tau + 1/3 [\Psi_y \omega_x^+ - \Psi_x \omega_y^+ + (\Psi \omega_x^+)_y - (\Psi \omega_y^+)_x + \\ + (\Psi_y \omega)_x - (\Psi_x \omega)_y] = \frac{1}{Re} (\omega_{xx}^- + \omega_{yy}^-)^n. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Эта схема является, по существу, комбинацией трех различных схем, в том числе симметричной, а также консервативных схем, сохраняющих кинетическую энергию и квадрат вихря (энстрофию). Она реализована в виде отдельного модуля в новой версии комплекса программ на основе метода конечных разностей (см. разд. 6.1).

Тесты конечно-разностных схем для уравнений вихря и переноса. Приведенный выше набор схем в принципе известен и в той или иной мере используется в вычислительной практике. В каждом случае необходимо знать диапазон и условия применимости данной схемы. Авторами книги в течение ряда лет выполнены многочисленные тесты рассмотренных схем на различных задачах конвекции, включая расчеты переходных и турбулентных режимов. Основные факты приведены в работах [25, 58, 61, 64]. В последнее время работа разных авторов по тестам конечно-разностных схем начинает приобретать более организованный характер. Многие полезные и важные сведения изложены в монографиях [120, 122; 123, 155, 252, 264]. Однако расчеты нелинейных задач конвекции методами конечных разностей освещены все еще недостаточно. Здесь имеется и ряд методических трудностей, связанных с тем, чтобы отделить друг от друга различные погрешности вычисления и научиться устранять их. При-

Рис. 1.1. Изотермы (а) и линии тока (б) для стационарного режима конвекции в квадратной области (задача 1А) при $\text{Ra}=10^4$, $\text{Pr}=0,7$

Расчет по явной схеме (1.15), сетка 65×65 . Изотермы построены при $\Delta\theta=0,1$, на линиях тока $\Psi_{\min}=0, \Psi_{\max}=7,1$



ведем некоторые результаты тестов, относящиеся к трем элементам основной схемы (уравнение вихря, уравнение Пуассона и расчет граничных условий) в отдельности, а затем дадим ряд результатов более общего характера.

Для тестов здесь наиболее целесообразны задачи о тепловой конвекции в квадратной области. На рис. 1.1 показаны результаты расчета классической задачи о тепловой гравитационной конвекции в замкнутой квадратной области при изотермических боковых границах. Два варианта этой задачи различаются тепловыми режимами горизонтальных границ (условия теплоизоляции или линейное распределение температур). Для системы (1.6)–(1.8) граничные условия этой задачи имеют вид

$$\begin{aligned}x = 0, \quad 0 \leq y \leq 1, \quad \psi = 0, \quad \partial\psi/\partial x = 0, \quad \theta = 1; \\x = 1, \quad 0 \leq y \leq 1, \quad \psi = 0, \quad \partial\psi/\partial x = 0, \quad \theta = 0; \\y = 0, 1, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad \psi = 0, \quad \partial\psi/\partial y = 0, \quad \partial\theta/\partial y = 0.\end{aligned}$$

Мы будем называть эту задачу с граничным условием теплоизоляции $\partial\theta/\partial y=0$ при $y=0, 1$, $0 \leq x \leq 1$ задачей 1А, а ее вариант с линейным распределением температур $\theta=1-x$ при $y=0, 1$, $0 \leq x \leq 1$ — задачей 1Б. Физическая картина течения в такой области, рассчитанная численно и подробно рассмотренная в работах [58, 120, 129], состоит в том, что нагретые у левой стенки слои жидкости поднимаются вверх, а охлажденные у правой стенки опускаются вниз, в связи с чем в области образуется циркуляционное течение, как показано на рис. 1.1, перемешивающее жидкость и переносящее тепло от нагретой стенки к холодной.

Основной интегральной характеристикой конвективного теплообмена является среднее число Нуссельта, определяемое в виде

$$\overline{\text{Nu}}=\bar{q}H/\lambda(T_2-T_1),$$

где $\bar{q}=\frac{1}{H} \int_0^H q dy$ — средний поток тепла; $q=-\lambda \partial T / \partial x$ — местный поток тепла на боковой стенке. Число Нуссельта представляет

отношение среднего потока тепла при наличии конвекции к потоку тепла $q_0 = \frac{\lambda}{L} (T_2 - T_1)$, переносимому путем теплопроводности.

На стационарном режиме в задаче 1А средние потоки тепла на нагретой и холодной стенках должны быть одинаковы, что является дополнительной интегральной проверкой неконсервативных схем. Интегральной характеристикой интенсивности конвекции может служить, например, максимальное значение функции тока Ψ_{\max} .

На рис. 1.2, а сравниваются результаты расчета по установлению во времени среднего числа Нуссельта для трех упоминавшихся выше вариантов аппроксимации конвективных членов (центральные разности и аппроксимация Самарского) в неявной схеме для уравнений вихря и переноса тепла (1.13). Расчеты выполнены при числах $Ra=4 \cdot 10^4$, $Pr=1$ на равномерной сетке с числом узлов 21×21 ($h=l=0,05$). Процесс установления начался от стационарного состояния системы при значении $Ra=2 \cdot 10^4$. На рис. 1.2, б приведены зависимости среднего числа Нуссельта от среднего числа Рэлея на стационарном режиме, полученные при тех же условиях, что и для рис. 1.2, а.

Из рис. 1.2 следует, что схема с односторонними разностями, обладающая наибольшей «схемной вязкостью», при рассмотренных условиях приводит к наиболее быстрому установлению, но существенно занижает поток тепла. Симметричная схема с центральными разностями, обладающая наименьшей схемной вязкостью, приводит к более медленному установлению, имеющему колебательный характер. На такой сетке эта схема дает пилообразные решения при числе $Gr > 10^7$. Однако в тех условиях, где она применима, ее результаты, по-видимому, точнее других упомянутых вариантов схем. Аппроксимация Самарского, являясь монотонной, формально применима для задач этого типа при любых числах Грасгофа и дает значения числа Нуссельта, находящиеся между значениями, полученными с помощью симметричной схемы и схемы с направленными разностями. В связи с этим аппроксимация Самарского широко применялась в расчетах на достаточно подробных сетках и при весьма больших числах Грасгофа, включая диапазон чисел Грасгофа, соответствующий переходным и турбулентным режимам конвекции в вертикальном слое. Соответствующие тесты представлены в разд. 3.1 и работах [61, 64], где также проводится сопоставление с экспериментальными данными.

На рис. 1.3 приведены зависимости местного числа Нуссельта $Nu_x = qx/\lambda(T_2 - T_1)$ от местного числа Грасгофа $Gr_x = (g\beta_r x^3/v^2) \times (T_x - T_{\max})$ на нагретой стенке вертикального слоя, рассчитанные на различных сетках. На грубых сетках число Нуссельта занижено, откуда следует необходимость применения достаточно подробных сеток в области чисел Грасгофа $Gr_x \geq 10^7$. Практически выполнить расчеты, удовлетворительно описывающие экспериментальные результаты в этом диапазоне чисел Грасгофа, уда-

ется, как показано в работах [61, 64], используя сетки с сильным сгущением у стенки.

Для тестов и параметрических исследований схем тепловой гравитационной и термокапиллярной конвекции в квадратной области целесообразна использованная в [25] упрощенная поста-

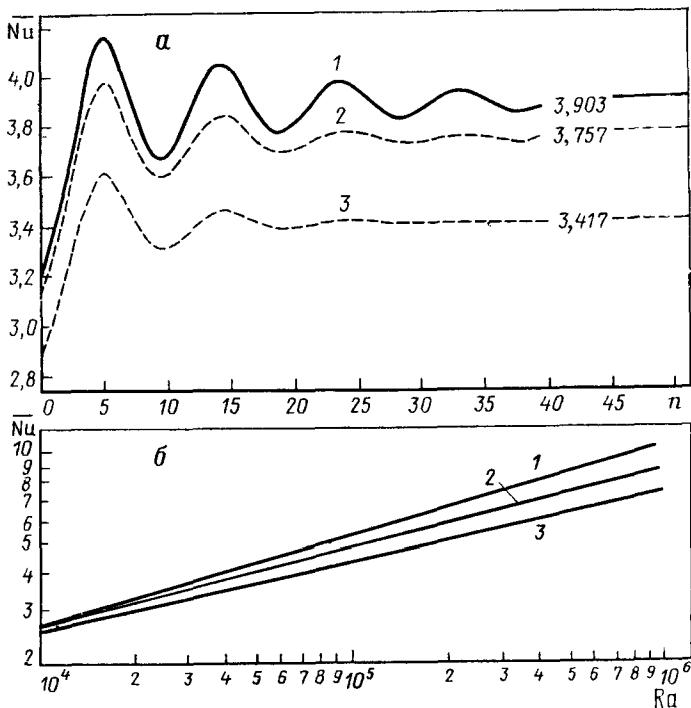


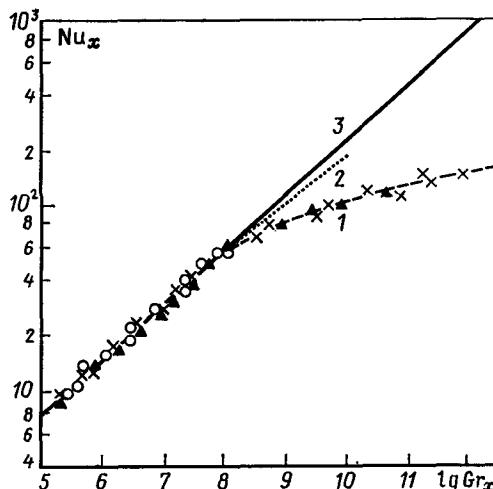
Рис. 1.2. Влияние аппроксимации конвективных членов на среднее число Нуссельта в квадратной области (задача 1A)

Расчет по схеме (1.13). *а* — переходный режим от значения $Ra = 2 \cdot 10^4$ к $Ra = 4 \cdot 10^4$; *б* — стационарные значения.

1 — центральные разности, 2 — монотонная аппроксимация, 3 — направлённые разности

Рис. 1.3. Влияние пространственного шага сетки на местное число Нуссельта в вертикальном слое

Расчет по схеме (1.13), монотонная аппроксимация. 1 — сетка 19×181 , 2 — сетка 37×91 , 3 — эмпирическая зависимость



новка задачи, в которой предполагается, что конвекция не оказывает влияния на поле температур (это справедливо в предельном случае $\text{Pr}=0$), а вихрь на границе области задан. Последнее позволяет отделить влияние на численные решения аппроксимации граничных условий для вихря. Таким образом, решается система уравнений (1.6) и (1.7) при заданной правой части F .

В задаче о гравитационной конвекции, которую будем называть далее задачей 2A, вихрь на границе равен нулю, правая часть уравнения (1.6) $F=10^4$. В задаче о термокапиллярной конвекции (задача 2B) вихрь на границе области задан в виде

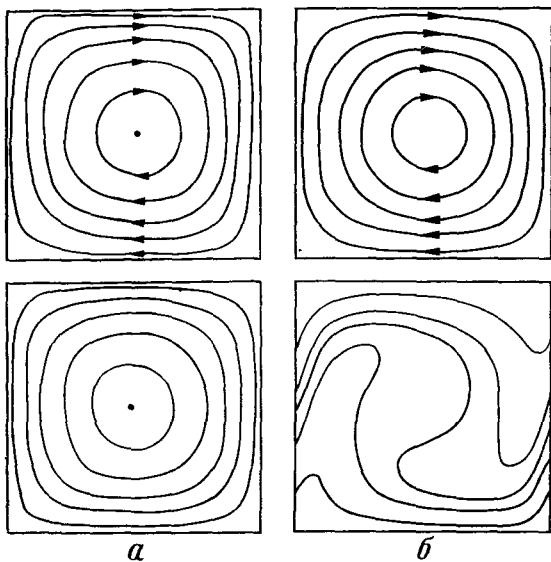


Рис. 1.4. Изолинии функции тока (вверху) и вихря (внизу) в тестовых задачах

a — задача 2A, $\text{Gr}=10^4$; *b* — задача 2B, $\text{Mn}=500$

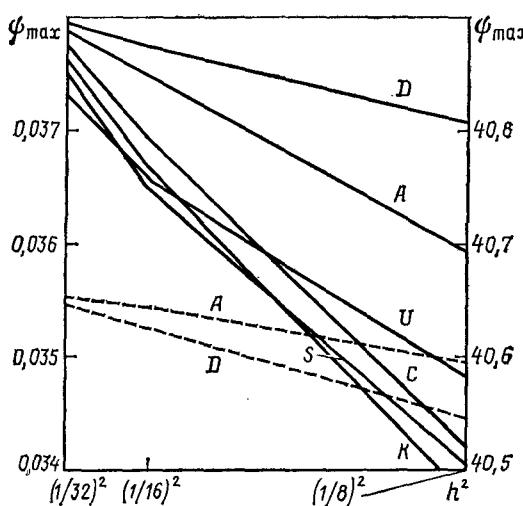


Рис. 1.5. Зависимости максимального значения функции тока от пространственного шага сетки для различных схем

Сплошные линии — задача 2A (ось ординат слева), штриховые — задача 2B (ось ординат справа)

$\omega_r = y$, правая часть F равна нулю. Картинны полей вихря и функции тока для этих двух задач даны на рис. 1.4.

Результаты тестов различных конечно-разностных схем для уравнений переноса в задачах 2А и 2Б представлены на рис. 1.5, где сравниваются максимальные значения функции тока при различных шагах сетки (A — схема Аракавы (1.16), D — неявная консервативная схема (1.14), U — явная схема с направленными разностями, C — симметричная явная схема, S — явная схема с аппроксимацией Самарского (три последние схемы (U , S , C) записаны в одном выражении (1.15)), K — основная неявная схема (1.13) в комплексе программ (см. разд. 6.1), в которой на верхнем временном слое используется аппроксимация Самарского, а на нижнем — симметричная схема). Результаты иллюстрируют сходимость схем при уменьшении пространственного шага сетки. Оказывается, что схемы по-разному ведут себя в сравнении с другими схемами как в различных задачах, так и в одной и той же задаче, но при разных значениях пространственного шага сетки (или разностного числа Рейнольдса). В задаче 2А наилучшие результаты дают схема A и весьма близкая к ней схема D , а в задаче 2Б — схема D .

На грубых сетках наихудшие результаты дает схема K , но при уменьшении шага сетки она дает результаты, близкие к симметричной схеме. Интересно, что на весьма грубых сетках явная схема с направленными разностями в этой задаче оказывается точнее, чем симметричная схема Самарского.

Результаты такого типа, не следующие из оценок остаточных членов этих схем, были получены и в работах других авторов. Они показывают, что в конечно-разностном описании нелинейных гидродинамических процессов, в особенности на грубых сетках, можно встретиться с неожиданными результатами, часто не имеющими физического объяснения.

1.1.3. Решение уравнения для функции тока

Усовершенствование этого элемента основной схемы играет важную роль в связи с необходимостью на каждом временном слое решать стационарное эллиптическое уравнение Пуассона (1.7). В основной схеме и комплексе программ в настоящее время применяются три метода: неявный итерационный метод переменных направлений и два прямых — метод разделения переменных с применением быстрого преобразования Фурье и маршрут-метод. Первый из них более универсален, но и более трудоемок, в особенности при необходимости достижения малой величины невязки. Второй и третий методы дают возможность получить решение разностных уравнений с «машинной» точностью, но имеют существенные ограничения по геометрии расчетной области и конструкции сеток.

Итерационный метод переменных направлений. Заменяя уравнение (1.7) нестационарным уравнением

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \sigma} = \psi_{rr} - \frac{1}{r} \psi_{rr} + \psi_{zz} - \omega, \quad (1.17)$$

где σ — итерационный параметр, аналогичный времени, запишем схему переменных направлений для этого уравнения по аналогии со схемой (1.13) в виде

$$\frac{\psi^{s+\frac{1}{2}} - \psi^s}{\sigma_{sr}} = \psi_{rr}^{s+\frac{1}{2}} - \frac{1}{r} \psi_r^{s+\frac{1}{2}} + \psi_{zz}^s - \omega^{n+1},$$

$$\frac{\psi^{s+1} - \psi^{s+\frac{1}{2}}}{\sigma_{sz}} = \psi_{rr}^{s+\frac{1}{2}} - \frac{1}{r} \psi_r^{s+\frac{1}{2}} + \psi_{zz}^{s+1} - \omega^{n+1}. \quad (1.18)$$

Здесь s — итерационный индекс; σ_{sr} , σ_{sz} — итерационные параметры, в общем случае различные по различным направлениям и изменяющиеся от итерации к итерации. Разностные уравнения (1.18) сводятся к стандартному трехдиагональному виду и решаются методом прогонки.

При использовании схемы в общей системе возникают следующие вопросы, важность которых возрастает при росте числа Рейнольдса: выбор требуемой точности решения уравнения (1.7), критерий точности решения этого уравнения и оптимизация итерационного процесса, т. е. выбор набора итерационных параметров σ_{sr} , σ_{sz} , приводящих к наименьшему числу итераций при заданной точности.

Возможны (и испытывались на практике) два подхода к решению уравнения (1.7) в основной схеме. В первом из них, строго применимом только для решения стационарной задачи, осуществляется по одной итерации уравнения вихря и уравнения функции тока. При малых значениях числа Рейнольдса такой способ достаточно эффективен. Это связано с тем, что невязка в решении уравнения (1.7) не влияет на точность решения системы в целом. Однако при решении нестационарных задач при больших числах Рейнольдса такой способ оказывается малоэффективным. Практика последних лет свидетельствует, что в этом случае следует возможно точнее решать уравнение (1.7).

Наиболее объективным критерием точности является относительная величина невязки решения уравнения (1.7)

$$\delta_{\Delta\psi} = \left| \frac{\Delta\psi_{i,j} - \bar{\omega}_{i,j}}{\bar{\omega}} \right|,$$

где $\bar{\omega}$ — некоторое характерное (например, среднее) значение вихря. При этом критерием точности будет условие

$$\max_{i,j} \delta_{\Delta\psi} < \varepsilon.$$

Для оптимизации на каждом временном слое итерационного цикла решения уравнения Пуассона существует методика расчета оптимальной серии итерационных параметров (различных по направлениям и изменяющихся от итерации к итерации)

$$\sigma_{r,1}, \sigma_{r,2}, \dots; \sigma_{z,1}, \sigma_{z,2}, \dots,$$

при использовании которых невязка δ_ϕ уменьшается за минимальное число итераций. При расчете оптимальной серии требуется знать границы спектров разностных операторов уравнения Пуассона, которые, в свою очередь, зависят от сеточных параметров (пространственный шаг сетки, расположение узлов и т. д.), геометрии области (плоская, цилиндрическая и т. д.) и величины геометрического фактора (отношение сторон области и т. д.). Методика расчета такого оптимального набора параметров (см., например, [156]) разработана лишь для областей простейшего вида (плоские, цилиндрические).

Практически обычно задается фиксированное число итераций, для которого определяют набор параметров, позволяющий получить максимальное уменьшение невязки. Например, в плоской области при четырех итерациях величина невязки может быть уменьшена в 50–100 раз, при восьми итерациях — в 10^3 —5· 10^3 раз и т. д. При использовании основной схемы в области больших чисел Рейнольдса ($Re=10^3$ и более) такой путь является эффективным для обеспечения вычислительной устойчивости схемы. При этом уменьшение невязки решения уравнения Пуассона позволяет существенно увеличить величину временного шага τ .

Метод разделения переменных с использованием быстрого преобразования Фурье (БПФ). Использование этого метода (см., например, [64]) связано с представлением искомого решения в виде конечного ряда Фурье. Запишем выражения функции тока и вихря в некотором узле сетки i, j в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{i,j} &= \sum_{k=1}^{N_x-1} a_{k,i} \sin(\pi k_i / N_x), \\ \omega_{i,j} &= \sum_{k=1}^{N_x-1} b_{k,i} \sin(\pi k_i / N_x), \end{aligned} \quad (1.19)$$

где

$$a_{k,i} = \frac{2}{N_x} \sum_{l=1}^{N_x-1} \Psi_{i,l} \sin(\pi k_i / N_x), \quad 1 \leqslant j \leqslant N_y - 1;$$

аналогичное выражение можно записать для $b_{k,j}$.

Здесь использовано разложение сеточной функции в ряд только в одном направлении. Будем предполагать разностную сетку в этом направлении равномерной. Разностная аппроксимация уравнения Пуассона (являющаяся частным случаем аппроксимации (1.18)) будет иметь вид

$$\frac{\Psi_{i+1,j} - 2\Psi_{i,j} + \Psi_{i-1,j}}{h^2} + \frac{2}{l_j + l_{j-1}} \left(\frac{\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j}}{l_j} - \frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i,j-1}}{l_{j-1}} \right) = \omega_{i,j}.$$

Для дальнейшего эту схему удобнее переписать в виде

$$\Psi_{i+1,j} + \Psi_{i-1,j} + \alpha \Psi_{i,j} + \beta \Psi_{i,j+1} + \gamma \Psi_{i,j-1} = p \omega_{i,j}, \quad (1.20)$$

где $\alpha = -2 + h^2(R_j + R_{j-1})$; $\beta = h^2R_j$; $\gamma = h^2R_{j-1}$; $R_j = 2/l_j(l_j + l_{j-1})$; $p = h^2$. Подставив (1.9) в (1.20), получим

$$\sum_{k=1}^{N_x-1} \left\{ a_{k,l} \left[\sin \frac{\pi k(i+1)}{N_x} + \sin \frac{\pi k(i-1)}{N_x} \right] + \alpha_i \sin \frac{\pi ki}{N_x} + \beta_j a_{k,j+1} \sin \frac{\pi ki}{N_x} + \gamma_j a_{k,j-1} \sin \frac{\pi ki}{N_x} \right\} = p \sum_{k=1}^{N_x-1} b_{k,l} \sin \frac{\pi ki}{N_x}. \quad (1.21)$$

Далее, приравнивая коэффициенты при одинаковых гармониках в уравнении (1.21), имеем

$$\beta_j a_{k,j+1} + \lambda_{k,j} a_{k,j} + \gamma_{k,j} a_{k,j-1} = p b_{k,j}, \quad (1.22)$$

где $\lambda_{k,j} = \alpha_j + 2 \cos(\pi k/N_x)$, $1 \leq j \leq N_y - 1$.

Система (1.22) для каждого k решается методом прогонки для определения величин $a_{k,j}$. Затем функция тока $\psi_{i,j}$ отыскивается с помощью обратного преобразования (1.19).

Результаты конкретных расчетов показывают, что решение уравнения Пуассона на сетке с числом узлов около 4000 изложенным выше методом занимает примерно столько же времени, сколько четыре итерации по методу переменных направлений (схема (1.18)). При этом невязка соответствует «машинной точности». Применение этого метода ограничено по сравнению с итерационным методом еще конструкцией сетки (в одном из направлений сетка должна быть равномерной) и характером граничных условий.

Марш-метод, или марш-алгоритм, так же как и метод разделения переменных с применением быстрого преобразования Фурье, является прямым методом. Он основан на применении одного из вариантов метода исключения Гаусса (блочное исключение Гаусса), сводящего исходную систему конечно-разностных алгебраических уравнений к некоторой редуцированной системе. Решение полученной редуцированной системы осуществляется методом разложения по базису с применением быстрого преобразования Фурье. Нами используется программная реализация этого метода в виде программы FHS11 из комплекса программ для решения эллиптических уравнений [15]. В упомянутой программе используется модификация марш-метода (ММА), предложенная в работе [85], отличающаяся экономичной схемой исключения неизвестных и, по-видимому, меньшим числом операций, чем другие прямые методы решения уравнения Пуассона.

В табл. 1.1 приведены времена счета задачи Дирихле для уравнения Пуассона в квадратной области на равномерных сетках с числом узлов от 72 до 4160 прямыми методами БПФ и MMA. На сетках с числом узлов около 10^3 быстродействие MMA по сравнению с БПФ $\alpha = 5 \div 6$, а на сетках около 10^4 эта величина возрастает примерно до 10. Таким образом, для задач, в которых можно избежать использования неравномерных сеток, примене-

Таблица 1.1. Затраты времени на решение задачи Дирихле для уравнения Пуассона методами БПФ и ММА

Сетка	n	$t_{\text{БПФ}}, \text{с}$	$t_{\text{ММА}}, \text{с}$	α
9×10	72	0,05	0,017	3
17×18	272	0,23	0,05	4,5
33×33	1056	1,00	0,15	6,5
65×66	4160	4,5	0,55	8

Обозначения: n — число внутренних узлов; $t_{\text{БПФ}}$, $t_{\text{ММА}}$ — времена центрального процессора ЭВМ ЕС-1040 для методов БПФ и ММА соответственно, $\alpha = t_{\text{ММА}} / t_{\text{БПФ}}$.

Использование модифицированного марш-метода позволяет существенно сократить время решения уравнения Пуассона и, таким образом, всей системы уравнений Навье—Стокса в целом.

1.1.4. Аппроксимация граничных условий для вихря

Границные условия в случае твердой неподвижной поверхности, как упоминалось выше, имеют вид

$$\psi = 0, \quad \partial\psi/\partial n = 0. \quad (1.23)$$

Оба этих условия относятся к системе (1.6)–(1.9) в целом, но заданы лишь для функции тока, а не для вихря. Поэтому при численном решении разностных уравнений для вихря возникает проблема определения недостающих граничных условий. Для решения этой проблемы имеется несколько путей; мы рассмотрим два из них.

Всюду ниже для расчета уравнений вихря и функции тока будет предполагаться использование разностных схем в общем случае на неравномерных сетках, рассмотренных в п. 1.1.2 и 1.1.3. Однако формулы для производных вблизи границы при этом будут всегда аппроксимироваться на равномерной сетке, что связано с необходимостью сохранения высокой точности в непосредственной близости к границе и удобством написания формул. Для первых и вторых производных, аппроксимируемых внутри области, используются следующие формулы:

$$\frac{\partial\psi}{\partial n} = \frac{-3\psi_0 + 4\psi_1 - \psi_2}{2h} + O(h^2), \quad (1.24)$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial n^2} = \frac{-7\psi_0 + 8\psi_1 - \psi_2}{2h^2} - \frac{3}{h} \left(\frac{\partial\psi}{\partial y} \right)_0 + O(h^2). \quad (1.25)$$

Разложение функции тока в ряд вблизи границы. Этот способ, применявшийся еще в работах Тома (см. [170]), состоит в том, что функция тока вблизи границы представляется в виде ряда Тейлора, например

$$\psi_{t,1} = \psi_{t,0} + h \left(\frac{\partial\psi}{\partial n} \right)_{t,0} + \frac{h^3}{2!} \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial n^2} \right)_{t,0} + \dots \quad (1.26)$$

Если в разложении (1.21) отбросить члены выше второго порядка по h , то можно получить выражение для вихря на границе в виде

$$\omega_{t,0} = \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial n^2} \right)_{t,0} = \frac{2(\psi_{t,1} - \psi_{t,0})}{h^2} - \frac{2}{h} \left(\frac{\partial \psi}{\partial n} \right)_{t,0} + O(h).$$

При практическом использовании этой формулы предполагается, что граничные условия (1.23) выполняются. Это приводит к простому соотношению, связывающему вихрь на границе с функцией тока в ближайшем к границе узле сетки:

$$\omega_{t,0} = 2\psi_{t,1}/h^2. \quad (1.27)$$

Связь между вихрем и функцией тока на границе может быть найдена и непосредственно из уравнения для функции тока, если считать его справедливым и на границе области. При этом можно получить формулы и более высокого порядка, аппроксимируя вторую производную функции тока по формулам типа (1.25). Например, полагая в формуле (1.25) справедливыми условия (1.23), получим формулу второго порядка, связывающую значение вихря на границе и функцию тока в двух узлах сетки, примыкающих к границе:

$$\omega_{t,0} = (8\psi_{t,1} - \psi_{t,2})/2h^2 + O(h^2). \quad (1.28)$$

При использовании формул (1.27) или (1.28) граничное условие прилипания (1.23) выполняется косвенно; например, для (1.28) на решении имеет место соотношение

$$\frac{\partial \psi}{\partial n}|_r = O(h^3),$$

откуда следует, что $(\partial \psi / \partial n)|_r \neq 0$, т. е. на твердой стенке имеется некоторая скорость скольжения, соответствующая порядку точности аппроксимации производной функции тока. При этом вихрь на границе в соответствии с формулой (1.28) аппроксимируется с точностью $O(h^2)$.

Приближенные граничные условия (1.27) или (1.28) замыкают систему разностных уравнений основной схемы. Полная последовательность расчета по этой схеме может быть, например, следующей:

1) по известным значениям поля вихря $\omega_{t,j}^n$ и поля функции тока $\Psi_{t,j}^{n-1}$ определяется поле функции тока $\Psi_{t,j}^n$ путем применения какого-либо из рассмотренных в п. 1.1.3 метода решения уравнения Пуассона при заданном условии $\psi=0$ на границе области;

2) по формуле (1.28) определяется значение вихря на границе области ω_r^{n+1} ;

3) с использованием того или иного метода (см. п. 1.1.2) определяется поле вихря $\omega_{t,j}^{n+1}$ при найденном граничном условии ω_r^{n+1} и заданном значении $\omega_{t,j}^n$. Далее весь цикл повторяется. Результаты практически не зависят от того, начинается расчет с поля функции тока или с поля вихря.

Непосредственное удовлетворение граничным условиям. Идея этого подхода, предложенного в работах [58, 142] (см. также [260]), состоит в том, чтобы обеспечить выполнение разностного аналога граничного условия прилипания $(\partial\psi/\partial n)_r=0$ на каждом временном слое непосредственно, что достигается подправлением поля функции тока $\psi(x, y, t)$ вблизи границы.

Пусть решение системы (1.16), (1.17) ищется в некоторой области Ω_0 . Рассмотрим внутри области Ω_0 вспомогательную область Ω_1 , границы которой располагаются от границы основной области Ω_0 на расстоянии одного шага сетки. Уравнение для вихря при этом решается в области Ω_1 , а уравнение для функции тока в области Ω_0 . Последовательность расчета такова.

1. Граничные условия для вихря ω_a на границе области Ω_1 определяются исходя из уравнения для функции тока. Для этого используется, например, следующая аппроксимация этого уравнения:

$$\omega_{a_i} = (\psi_{i+1,i} - 2\psi_{i,i} + \psi_{i-1,i})/h^2 + (\psi_{i,i+1} - 2\psi_{i,i} + \psi_{i,i-1})/l^2.$$

2. Поле вихря в момент времени $n+1$ внутри области Ω_1 определяется при известном поле вихря $\omega_{i,j}^{n+1}$ и значении вихря на границе ω_{a_i} .

3. Поле функции тока внутри основной области Ω_0 при найденном значении вихря $\omega_{i,j}^{n+1}$ определяется путем решения уравнения для функции тока с граничным условием $\psi_r=0$, заданным на границе основной области Ω_0 . Для этого может использоваться любой из методов, рассмотренных в п. 1.1.3.

4. Значение функции тока на границе области Ω_1 подправляется с помощью разностного аналога условия $(\partial\psi/\partial n)_r=0$.

Использование односторонней четырехточечной аппроксимации производной $(\partial\psi/\partial n)_r$ внутрь области по формуле (1.24) приводит к соотношению

$$\psi_1^{n+1} = \frac{1}{2}\psi_2^{n+1} - \frac{1}{6}\psi_3^{n+1}, \quad (1.29)$$

которое может применяться непосредственно для замыкания прогонок при определении поля функции тока внутри области Ω_0 . Далее весь цикл 1—3 повторяется.

При решении стационарной задачи этот метод позволяет, таким образом, непосредственно удовлетворить граничным условиям прилипания с той точностью, которая соответствует формуле, использованной для подправления.

При распространении данного метода на класс нестационарных задач следует учитывать то обстоятельство, что разностное уравнение для вихря в приграничных узлах и уравнение для функции тока в узлах, отстоящих на два шага от границы, вообще говоря, не выполняются. Аналогичное обстоятельство имеет место и в рассмотренном выше методе Тома с той лишь разницей, что в последнем случае невязка имеется не в приграничных узлах, а в узлах, расположенных на самой границе. Способ устранения этой невязки, предложенный в работе [64], состоит

в организации внутреннего цикла, цель которого заключается в подправлении вихря в приграничных узлах непосредственно из разностного уравнения вихря.

Релаксация граничных условий. Использование приближенных граничных условий приводит обычно к существенному снижению устойчивости основной схемы. Одним из способов повышения устойчивости является так называемая релаксация (усреднение), согласно которой значения вихря на границе представляются в виде

$$\omega_r^{n+1} = \alpha f(\psi^{n+1}) + (1 - \alpha) \omega_r^n,$$

где α — параметр релаксации, изменяющийся в пределах $0 \leq \alpha \leq 1$, $f(\psi^{n+1})$ — зависимость между вихрем на границе и функцией тока, полученная каким-либо из рассмотренных выше методов.

Введение релаксации рассмотренного типа, строго говоря, возможно лишь для стационарных задач, где на решении имеет место $\omega_r^{n+1} = \omega_r^n$, т. е. выполняется соотношение, аппроксимирующее с соответствующей точностью условие прилипания. Для нестационарного режима использование релаксации приводит к дополнительной невязке в выполнении граничных условий прилипания, которая пропорциональна разности $\omega_r^{n+1} - \omega_r^n$. Для устранения этой невязки необходимо введение внутреннего итерационного цикла, в котором на каждом временном слое n вместе с решением уравнения вихря и уравнения для функции тока осуществляется релаксация граничных условий для вихря

$$\omega_r^{n,s+1} = \alpha f(\psi^{n,s+1}) + (1 - \alpha) \omega_r^{n,s},$$

где s — индекс итерационного цикла. Внутренние итерации осуществляются до выполнения условия

$$|\omega_r^{n,s+1} - \omega_r^{n,s}| < \varepsilon.$$

Тесты различных методов расчета граничных условий. В комплексе программ на основе метода конечных разностей (см. разд. 6.1) имеется специальная подпрограмма расчета граничных условий BOUNDA, в которой реализованы приведенные выше методы аппроксимации граничных условий для вихря, включая метод релаксации, формулы более высокого порядка точности, а также другие методы, предлагавшиеся различными авторами [76, 112, 166]. Описание возможностей этой программы и выполненных с ее помощью методических расчетов дано в работе [25]. Мы приведем некоторые результаты методических расчетов, выполненных в различные годы.

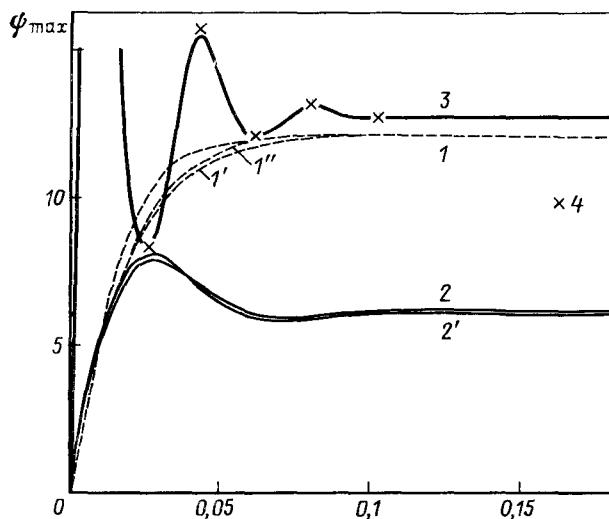
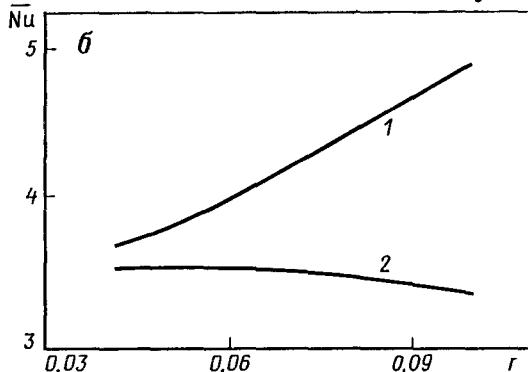
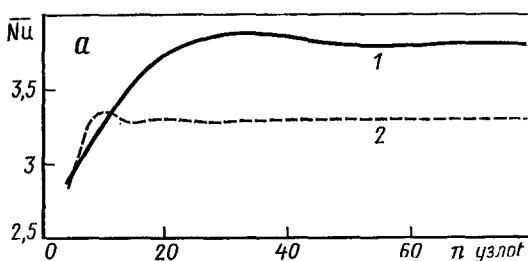
На рис. 1.6, а сопоставлен характер изменения числа Нуссельта по числу итераций при расчете на установление для рассмотренной выше тестовой задачи 1A при различных способах аппроксимации граничных условий. Здесь $Ra = 4 \cdot 10^4$, $Pr = 1$; использована неявная схема (1.13) в сочетании с итерационным методом решения уравнения Пуассона для функции тока при посто-

Рис. 1.6. Влияние аппроксимации граничных условий на среднее число Нуссельта для схемы (1.13) при $\text{Gr} = 4 \cdot 10^4$, $\text{Pr} = 1$ (монотонная аппроксимация)

a—переходный процесс; *b*—зависимость стационарного решения от шага сетки

Рис. 1.7. Зависимости максимального значения функции тока от времени ($\text{Pr} = 1$)

Ось ординат слева — для сплошных кривых справа — для пунктирных. Кривые 1, 2, 2', 3 — схема (1.13) с релаксацией, 1' — явная схема, 1'', 4 — схема (1.15) без релаксации. Для кривых 1, 1', 1'' число Gr равно 10^2 , 2, 2' — 10^4 , 3, 4 — 10^5 ; 1, 1'', 2 — сетка 33×33 , 1' — 21×21 , 2', 3 — 17×17



янном итерационном параметре $\sigma = 0.25$. Расчеты выполнены на равномерной сетке с числом узлов 21×21 . Кривая 1 соответствует аппроксимации граничных условий для вихря по ψ второго порядка точности (1.28), полученной путем разложения функции тока вблизи границы в ряд Тейлора при шаге по времени $\tau = 0.001$, который в этом случае является предельным условием устойчивости. Кривая 2 соответствует формуле (

при $\tau=0,005$. Видно, что аппроксимация граничных условий этого типа дает значительно более быструю сходимость к стационарному решению.

Следует отметить, что обе эти формулы дают различные приближения к точному решению. Это показано на рис. 1.6, б, где приведено изменение числа Нуссельта на стационарном режиме в зависимости от шага разностной сетки для формулы (1.28) (кривая 1) и формулы (1.29) (кривая 2). Видно, что формула первого типа дает приближение к точному решению сверху, а вторая — снизу, причем разлине результатов расчета числа Nu существенно уменьшается при измельчении сетки, что является одним из практических доказательств сходимости.

В приведенных выше расчетах релаксация граничных условий не использовалась. На рис. 1.7 сравниваются результаты расчетов тестовой задачи 1Б при наличии релаксации и без релаксации. Для этой задачи параметр релаксации в диапазоне $0,3 \leq \alpha \leq 0,7$ мало влияет на возможность увеличения временного шага в расчетах при наличии внутренних итераций. Из рис. 1.7 видно, что применение релаксации при таком способе расчета не искажает стационарное решение и дает возможность правильно рассчитать переходный режим.

Введение релаксации дает возможность увеличить временной шаг в этом примере в 5 раз. В задаче о конвективном тепломассообмене при жидкостной эпитаксии (см. разд. 4.3), для которой характерно медленное изменение параметров во времени, увеличение временного шага при наличии релаксации составило величину 10^3 . Важное значение имеет введение релаксации также при расчете стратифицированных течений, для которых характерен длительный процесс установления колебаний (см. разд. 5.2). Вместе с тем следует иметь в виду, что при слишком большом

Таблица 1.2. Результаты расчетов тестовой задачи 1А

Ra	Схема, сетка *	\bar{Nu}	Nu_{\max}	Nu_{\min}	$V_{\max} _{y=0,5}$	$U_{\max} _{x=0,5}$	Ψ_{\max}
10^4	1	2,244	3,536	0,582	19,50	16,11	5,064
	2	2,244	3,534	0,587	19,50	16,10	5,051
	3	2,243	3,528	0,586	19,62	16,18	5,071
10^5	1	4,509	7,720	0,708	67,48	34,40	9,584
	2	4,543	7,821	0,721	67,30	34,83	9,542
	3	4,519	7,717	0,729	68,59	34,73	9,612
10^6	1	8,653	16,76	0,880	205,1	62,85	16,52
	2	9,012	18,26	0,967	204,0	61,90	16,40
	3	8,800	17,93	0,989	219,4	64,63	16,75

* 1 — сетка 65×65 , схема (1.13), аппроксимация Самарского; 2 — сетка 65×65 , схема (1.15), центральные разности; 3 — интерполяция для $h \rightarrow 0$ результатов применения сеток от 11×11 до 81×81 [273].

значении временного шага и (или) при выборе параметра релаксации далеким от оптимального возможно искажение как переходного процесса, так и стационарного решения.

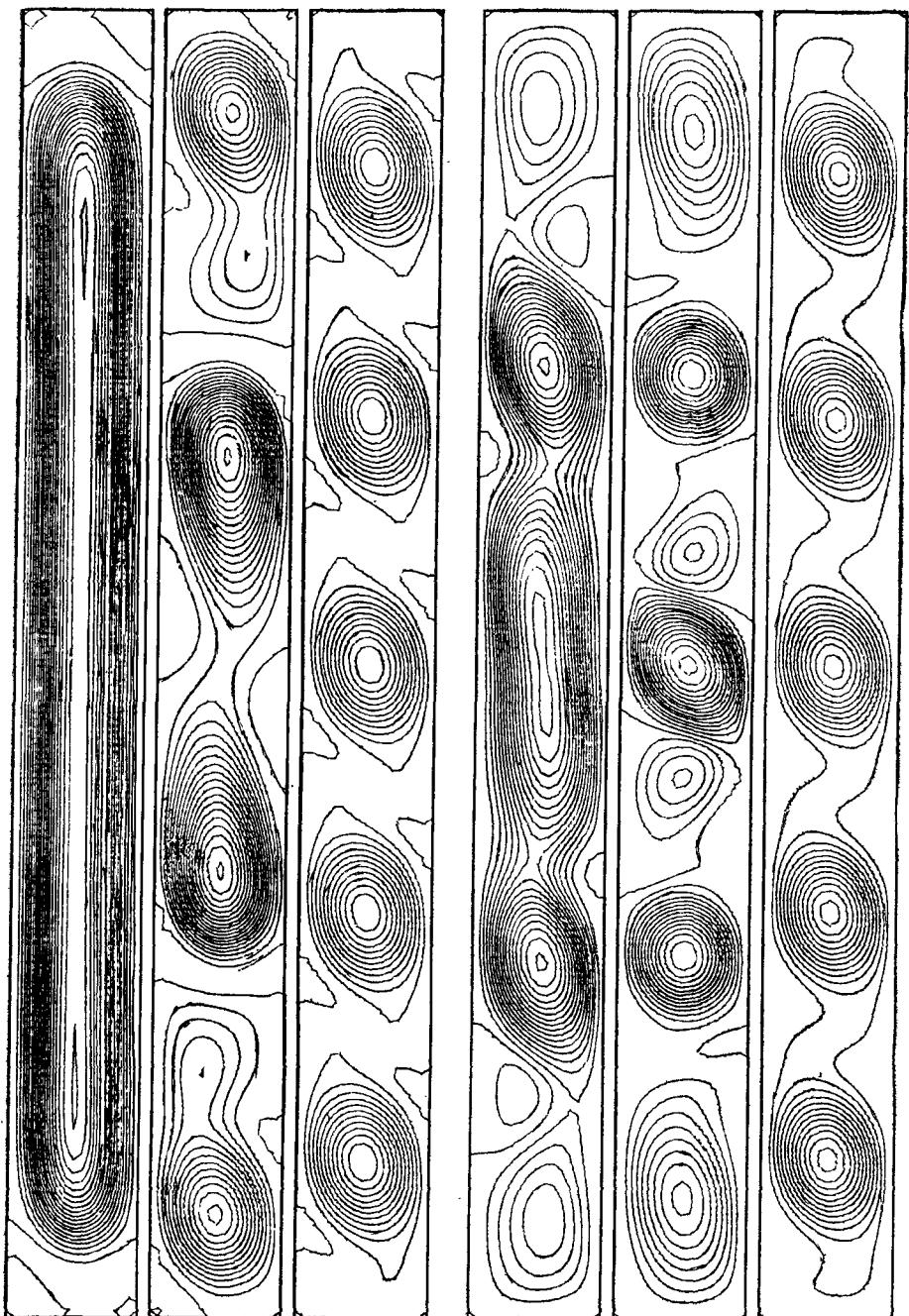
В заключение этого раздела мы приведем значения некоторых характеристик конвективного тепломассообмена на стационарном режиме в задаче 1A, полученные в работе [25] по различным схемам при $\text{Pr}=0,71$ в диапазоне чисел Рэлея до 10^6 (табл. 1.2). Отсылая за более детальными сведениями и обсуждениями к работе [25], отметим, что в указанном диапазоне параметров рассмотренные конечно-разностные схемы на достаточно подробных сетках (44×41 , 65×65) дают результаты, близкие к тем, которые получаются по схемам, имеющим формально более высокий порядок аппроксимации. В связи с этим при усовершенствовании схем основные усилия были направлены на повышение устойчивости и снижение затрат на расчет временного слоя.

1.1.5. Тесты конечно-разностных схем на нестационарных задачах

Из большого разнообразия нестационарных процессов мы рассмотрим три основных вида, чаще всего встречающихся в дальнейшем: переходные процессы, связанные с установлением стационарного режима, нестационарные процессы, обусловленные изменением внешних (например, тепловых) условий и собственные колебания гидродинамической системы после потери устойчивости равновесия или движения.

Рассмотрим вторичные структуры и эволюцию течения после потери устойчивости конвективного движения, а также схемные параметры, которые необходимо использовать для достоверного описания вторичных структур. На рис. 1.8 приведены результаты расчета одной из типичных модельных задач конвекции в вертикальном слое с условиями прилипания на стенках при отношении сторон $H/L=10$ и при значении $\text{Pr}=0$. Поле температуры в этом случае не зависит от поля скорости, и уравнения (1.6) и (1.7) для вихря и функции тока можно рассчитывать независимо от других уравнений системы (1.6)–(1.9). При $\text{Pr}=0$ такое же течение будет в горизонтальном слое, если один торец нагрет, а другой охлажден. Расчеты структуры конвекции, представленные на рис. 1.8, *a*, *b*, выполнены при $\text{Gr}=5 \cdot 10^4$ с помощью двух численных методов. Один из них включает явную схему Аракавы (1.16) для уравнения вихря в сочетании с прямым методом БПФ (см. п. 1.1.3) для решения уравнения Пуассона (1.7). Другой численный метод — неявная энергетически нейтральная схема для вихря и схема четвертого порядка точности для уравнения Пуассона, применяемая группой французских ученых [199].

Расчеты выполнены на равномерной сетке с одним и тем же числом узлов 17×200 . Основной результат сопоставления заключается в том, что при достаточно подробной сетке удается полу-



a

b

чить одинаковую структуру вторичного течения (пять ячеек) на стационарном режиме. Об этом свидетельствуют также данные о распределении функции тока по горизонтали, представленные на рис. 1.8, в. Заметим, что применение схемы Самарского дает в этом случае другие результаты (четыре вихря). Различие в эволюции течения во времени связано с тем, что в схеме [199] используется аппроксимация не истинного, а некоторого фиктивного нестационарного процесса.

При резком изменении тепловых условий на границе возникают значительные градиенты, которых «не выдерживают» неконсервативные схемы. На рис. 1.9 показано распределение температуры в одном из сечений охлаждаемого сверху слоя жидкости (о постановке задачи см. разд. 5.2). Применение схемы (1.13) на сетке 65×65 приводит к пилообразным решениям, причем температуры могут приобретать значения, меньшие нуля или большие единицы, что противоречит физическому смыслу задачи. Применение упоминавшегося в п. 1.1.2 варианта основной схемы с дивергентной аппроксимацией уравнения переноса тепла [185] (см. рис. 1.9, кривая 2) позволяет исключить этот нежелательный вычислительный эффект. Аналогичный результат можно было бы получить, применяя схему (1.13) на неравномерной, изменяющейся во времени сетке, существенно сгущающейся в области больших температурных градиентов, что в данном случае более трудоемко.

В заключение этого раздела вернемся вновь к задаче 1Б и приведем данные тестов в диапазоне чисел Грасгофа, где появляются собственные нестационарные колебания гидродинамической системы. На рис. 1.10 показано изменение во времени максимального значения горизонтальной составляющей скорости при $Gr=2 \cdot 10^6$, $Pr=1$, полученное по явной схеме (1.16) на сетке

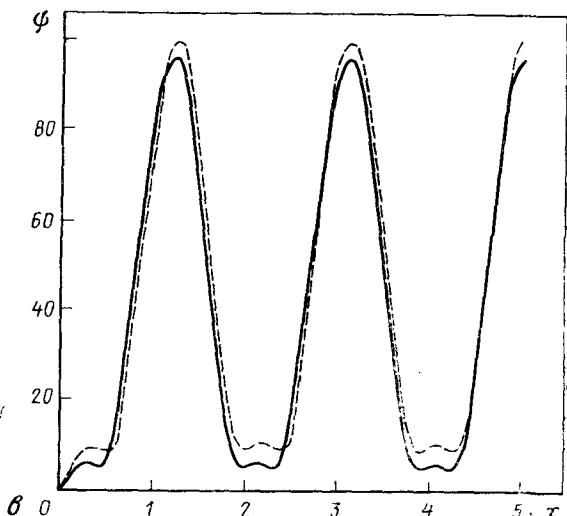


Рис. 1.8. Тесты схем для конвективных течений со сложной структурой

а, б — линии $\psi = \text{const}$ в переходном режиме в разные моменты времени для схем (1.16) и [199] соответственно; в — распределение функции тока вдоль вертикальной линии для стационарного решения (сплошная линия — схема (1.16), штриховая — схема [199])

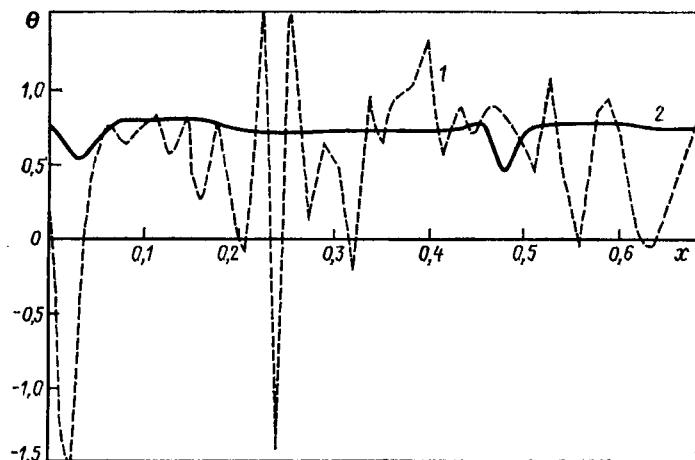


Рис. 1.9. Распределение температуры в горизонтальном сечении приповерхностного слоя жидкости в задаче о конвекции при охлаждении поверхности (см. п. 5.2)

1 — схема (1.13), 2 — схема (1.13) с интегральными граничными условиями для уравнения переноса тепла

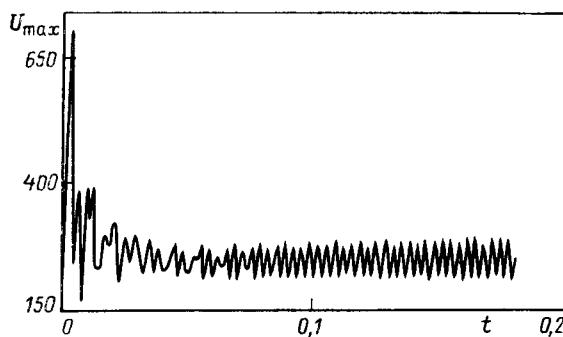


Рис. 1.10. Установление во времени регулярных колебаний максимального значения составляющей скорости при $\text{Gr} = 2 \cdot 10^6$, $\text{Pr} = 1$

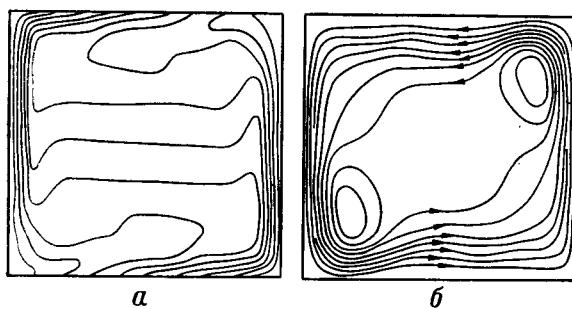


Рис. 1.11. Мгновенные картины изотерм (а) и линий тока (б) для квазистационарного режима колебаний при $\text{Gr} = 2 \cdot 10^6$, $\text{Pr} = 1$

65×65 и иллюстрирующее колебания этого вида. После некоторого переходного периода длительностью $t \approx 0,06$ устанавливаются регулярные колебания, амплитуда которых увеличивается, а период уменьшается при увеличении числа Грасгофа. Эти колебания имеют физическую природу и связаны с потерей устойчивости основного конвективного движения, в результате чего, как показано на рис. 1.11, образуются вторичные течения. Начало возникновения этих колебаний, а также их характеристики за порогом устойчивости согласуются с результатами расчетов, выполненных в работе [167].

Зависимость периода \bar{T} колебаний от числа Грасгофа, полученная численно (рис. 1.12), включает два участка. Первый, показанный линией 1, — низкочастотные затухающие колебания основного течения (линия 2 соответствует задаче 1A — теплоизолированные основания области). Второй участок, показанный линией 3, — высокочастотные колебания, связанные с образованием вторичных течений. Отметим, что симметричная аппроксимация схемы (1.13) правильно описывает начало возникновения колебаний, а в двух других ее вариантах — схема с направленными

Рис. 1.12. Зависимость периода колебаний от числа Грасгофа

1, 2 — затухающие колебания в процессе перехода к стационарному режиму,
3 — регулярные колебания.
4, 5 — соответственно результаты расчета и эксперимента в работе [167]

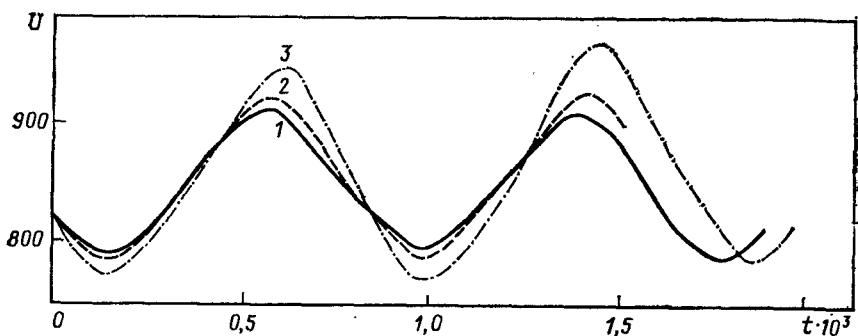
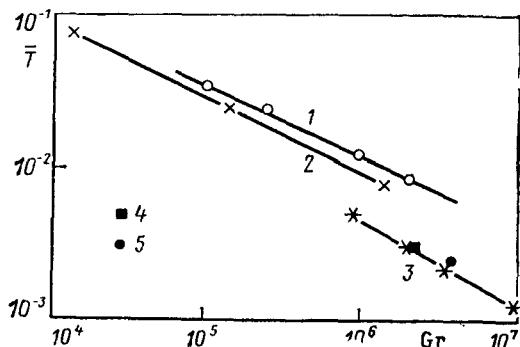


Рис. 1.13. Влияние временного шага на нестационарное решение при $Ra = 3,75 \cdot 10^8$, $Pr = 15$

1 — $\tau = 2 \cdot 10^{-5}$, 2 — $4 \cdot 10^{-5}$, 3 — $8 \cdot 10^{-5}$

разностями и схема Самарского — появление этих колебаний затянуто, что также согласуется с результатами тестов [167].

При существенном повышении числа Грасгофа колебания, если их рассматривать на достаточно большом интервале времени, имеют нерегулярный характер. Выяснение влияния схемных факторов на колебания такого типа имеет большое значение. Отсылая за деталями к работам [61, 64], приведем один методический результат расчета конвекции в вертикальном слое, подогреваемом сбоку ($L/H=11,2$, $Pr=15$, $Gr_L=3,75 \cdot 10^8$). Применившись схема (1.13) с аппроксимацией Самарского на неравномерной сетке 37×91 с сильным сгущением у стенки и итерационным методом решения уравнения Пуассона (1.18).

На рис. 1.13 показано рассчитанное изменение скорости во времени в пограничном слое у стенки на временному участке, соответствующем периоду колебаний при различных величинах временного шага τ . Отсюда следует, что и в этом случае можно найти диапазон параметров схемы, где их изменение будет мало влиять на результат расчета. Вместе с тем на грубой пространственной сетке или при больших значениях временного шага эти тонкие эффекты, конечно, не обнаруживаются. Сопоставить с экспериментальными данными в этом случае можно только среднестатистические параметры конвекции и их спектральные характеристики (см. [61, 64], а также разд. 3.1).

Колебания, имеющие физический характер, следуют, конечно, отличать от различных видов колебаний, проявляющихся в нелинейных конечномерных моделях у порога вычислительной устойчивости конечно-разностной схемы. Мы приведем ниже два примера, относящиеся к явной и неявной схемам для тестовой задачи конвекции 1Б при $Gr=10^6$, $Pr=1$ в расчетах на равномерной сетке 33×33 . Уравнение Пуассона для функции тока решалось прямым методом (см. п. 1.1.3).

При использовании явной схемы (1.16) с шагом $\tau=0,5\tau^*$, где $\tau^*=\min\{h^2/4, h/U_{\max}\}$ — предельный шаг по условию устойчивости, полученному на основе линеаризованной конечномерной модели уравнения типа переноса с диссиpацией (см., например, [122]), в данной задаче обнаруживаются регулярные колебания. На рис. 1.14, а показано изменение во времени среднего числа Нуссельта, иллюстрирующее эти колебания. При $\tau=0,25\tau^*$ эти колебания отсутствуют, реализуется стационарный режим.

На рис. 1.14, б приведен аналогичный график для неявной схемы (1.13) с аппроксимацией Самарского при $Gr=1,25 \cdot 10^6$, $Pr=1$ и аппроксимацией граничных условий (1.29). Увеличение шага по времени $\tau>10^{-4}$ приводит в этом случае к появлению квазистационарных колебаний, показанных на рис. 1.14, б. Наиболее вероятной причиной колебаний этого типа является упоминавшееся выше «рассогласование» полей вихря и функции тока при их раздельном решении. Другой причиной колебаний такого типа может быть, например, недостаточно точное решение уравнения Пуассона.

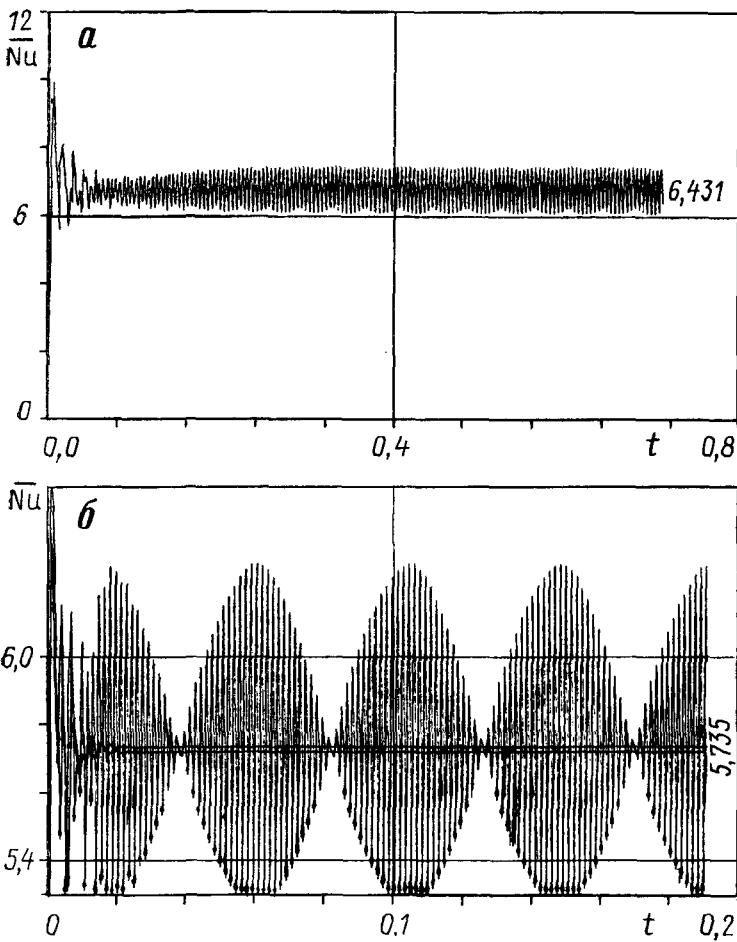


Рис. 1.14. Колебания среднего числа Нуссельта, обусловленные схемными факторами

а — схема (1.16), $\tau=0,5\tau^*$, $Gr=10^6$, центральные разности, сетка 65×65 ; *б* — схема (1.13), $Gr=1,25 \cdot 10^6$, монотонная аппроксимация, сетка 33×33

Эти примеры показывают, что конечно-разностные схемы для нестационарных уравнений Навье—Стокса в диапазоне параметров, соответствующих гидродинамической неустойчивости и турбулентному режиму, являются весьма тонким инструментом, так как должны, с одной стороны, отражать особенности, присущие этим сложным уравнениям, а с другой стороны — не проявлять побочных схемных эффектов. В связи с этим при численных расчетах в этой области все большее значение приобретает прецизионный физический эксперимент, выполненный в контролируемых условиях и специально ориентированный на тесты численных методов для нелинейных задач механики вязкой жидкости.

Такой эксперимент нужен не только для упоминавшихся сравнительно простых моделей «общего назначения», но и для специальных моделей. Дополнительные примеры, направленные на проверку адекватности математических моделей, приведены в разд. 1.2 и в гл. 3—5.

1.2. МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Как упоминалось выше, существует более десятка конечно-разностных схем для решения уравнений Навье—Стокса, отличающихся различными признаками. Особенностью этих схем является наличие различных сеточных параметров, рациональный выбор которых, как видно из разд. 1.1, трудоемок. Апроксимация решения вблизи границ и вообще в области больших градиентов полей искомых функций, где требуется сгущение сетки, построение конечно-разностных операторов, аппроксимирующих уравнения Навье—Стокса на произвольном сеточном шаблоне, также вызывает трудности.

В последние годы все более широкое распространение при конструировании численных алгоритмов приобретает метод конечных элементов (МКЭ), который имеет строгую математическую формулировку, являясь, с одной стороны, разновидностью метода сеток, а с другой — численной реализацией метода Ритца или Бубнова—Галеркина на конечном элементе. Высокую вычислительную эффективность метода обеспечивает выбор функций кусочно-полиномиального вида [77, 91, 107, 165]. Естественная возможность применения нерегулярных сеток в МКЭ позволяет эффективно аппроксимировать криволинейные границы области, а вариационная формулировка задачи позволяет легко учитывать различные типы граничных условий. Достоинством этого метода является также возможность автоматического составления системы уравнений конечных элементов.

Для задач, имеющих эквивалентную формулировку минимизации функционала, эффективность МКЭ подтверждена многочисленными теоретическими и практическими исследованиями [77, 91, 107, 119, 165]. Формулировка МКЭ в таких случаях фактически означает выполнение основных законов сохранения, поэтому система уравнений конечных элементов часто эквивалентна уравнениям, получаемым некоторыми другими методами (метод интегральных балансов, интегроинтерполяционный метод). На базе МКЭ в настоящее время создаются проблемно-ориентированные пакеты программ для целого класса задач механики сплошной среды [77, 86, 111, 144, 147].

Применения МКЭ к задачам о течении вязкой жидкости начались сравнительно недавно. Подробный обзор этих работ приводится в [147, 264, 279]. Важным достоинством МКЭ для задач гидромеханики является свойство консервативности и абсолютной устойчивости.

Вместе с тем формальное применение МКЭ к задачам гидромеханики может приводить к парадоксам. Например, выбор одинаковых базисных функций для аппроксимации скорости и давления [77, 144] может давать плохую точность или приводить к несовместной системе алгебраических уравнений. Поэтому вопросы выбора и сравнительного анализа МКЭ для задач гидромеханики следует уделять особое внимание. Ниже эти и другие вопросы будут изложены на основании исследований и результатов работ [3, 65, 66, 86, 126, 127, 144, 147, 176, 177].

Рассматриваются формулировки, практическая реализация и сравнительный анализ применения МКЭ и МКР к двумерным и осесимметричным задачам гидродинамики и конвективного тепломассообмена. В отличие от МКР (см. разд. 1.1) здесь используются уравнения в переменных скорость—давление. Приводятся основные идеи метода, формулировки МКЭ для ряда конкретных задач, примеры и тесты применения МКЭ и МКР в задачах гидромеханики, тепловой конвекции. Выполненные тесты указывают на возможность усовершенствования обоих методов за счет использования их лучших качеств¹. Реализация на ЕС ЭВМ пакета программ МКЭ на основе изложенной методики дана в разд. 6.2.

1.2.1. Подход к построению уравнений МКЭ и аппроксимация граничных условий

Для приведения исходной дифференциальной задачи к алгебраической в МКЭ будем использовать метод Галеркина. Рассмотрим его вначале на модельном примере краевой задачи теплопроводности

$$\Delta\theta + f(x, y) = 0, \quad (x, y) \in D, \quad (1.30)$$

$$\theta|_{\Gamma_1} = \varphi_1, \quad -\theta_n|_{\Gamma_2} = \alpha\theta - \beta. \quad (1.31)$$

Здесь D — двумерная область, $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$ — ее граница, $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = 0$. Выберем систему N линейно-независимых функций $\Psi^j(x, y)$, $j=1, 2, \dots, N$, удовлетворяющих условию

$$\Psi^j|_{\Gamma_1} = \varphi_1, \quad (1.32)$$

и будем искать приближенное решение $\theta(x, y)$ задачи (1.30), (1.31) в виде их линейной комбинации²:

$$\theta(x, y) = \theta^j \Psi^j(x, y). \quad (1.33)$$

¹ Методы конечных разностей в последние годы также интенсивно усовершенствуются в направлениях, близких к МКЭ (построение МКР на нерегулярных сетках, использование исходных вариационных формулировок, применение энергетически нейтральных схем типа Аракавы, рассмотренных в разд. 1.1).

² В дальнейшем всюду используется суммирование по повторяющимся индексам.

Приближенное решение будет наилучшим, если интеграл взвешенной невязки равен нулю:

$$\int_D [\Delta\theta + f(x, y)] \Psi^i dx dy = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (1.34)$$

Условие (1.34) означает ортогональность невязки уравнения к выбранному базису, если иметь в виду определение скалярного произведения

$$(U, V) = \int_D UV dx dy. \quad (1.35)$$

Условие (1.34) можно трактовать так же, как выполнение дифференциального уравнения, в некотором смысле в среднем в области.

Интегрируя (1.34) по формуле Грина с учетом краевых условий (1.31), получим

$$\int_D \nabla \theta \nabla \Psi^i dx dy + \int_{\Gamma_2} (\alpha \theta - \beta) \Psi^i d\Gamma = \int_D f \Psi^i dx dy, \quad (1.36)$$

где $\nabla \theta$ — градиент функции θ . Единственным требованием, предъявляемым к базисным функциям Ψ^i , как следует из (1.36), является непрерывность.

Подставляя (1.33) в (1.36), получим систему алгебраических уравнений для определения коэффициентов:

$$a_{ij} \theta^j = b_i, \quad (1.37)$$

где

$$a_{ij} = \int_D \nabla \Psi^i \nabla \Psi^j dx dy + \int_{\Gamma_2} \alpha \Psi^i \Psi^j d\Gamma,$$

$$(1.38)$$

$$b_i = \int_D f \Psi^i dx dy + \int_{\Gamma_2} \beta \Psi^i d\Gamma.$$

Таким образом, решение дифференциального уравнения, как и в МКР, сведено к решению системы алгебраических уравнений.

Трудности построения базисных функций, удовлетворяющих граничным условиям в случае криволинейных границ, сужают класс задач, решаемых классическим методом Галеркина. Возможности этого метода значительно расширяются, если выбрать базисные функции специального вида, имеющие малый носитель, т. е. отличные от нуля лишь в некоторой небольшой части области. В этом по существу и заключается особенность метода конечных элементов. Вся рассматриваемая область разбивается на подобласти, называемые конечными элементами. В одномерном случае эти элементы представляют собой просто отрезки. В двумерном случае набор возможных форм гораздо шире. Наиболее распространенными в настоящее время являются треугольные элементы (рис. 1.15). Базисная функция полагается равной 1 в i -м узле и обращается в 0 за пределами элементов, которым

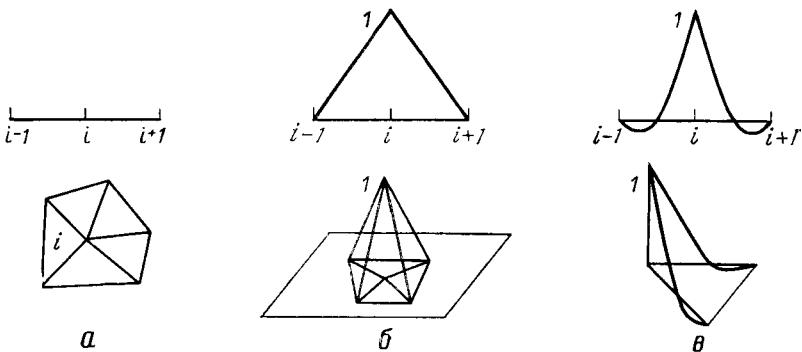


Рис. 1.15. Конечные элементы (а), линейные (б) и квадратичные (в) базисные функции в одномерном (вверху) и двумерном (внизу) случаях

принадлежит этот узел. Коэффициенты θ^j в (1.33) являются значениями функции в соответствующих узлах.

Для улучшения аппроксимации решения можно использовать базисные функции более высокого порядка, например квадратичные в пределах элемента (см. рис. 1.15, в). Применение локальных функций в методе Галеркина позволяет сравнительно легко аппроксимировать граничные условия. Соответствующая система уравнений (1.37) будет разреженной. Это можно использовать для построения экономичных алгоритмов.

Учет граничных условий первого рода (1.31) осуществляется на этапе решения системы линейных уравнений (1.37). Если k -й узел лежит на границе Γ_i , то k -е уравнение заменяется на $\theta^k = \varphi_i$. Отметим, что учет граничных условий второго и третьего рода производится автоматически при выводе уравнений МКЭ.

При аппроксимации граничных условий третьего рода в МКР, как известно, требуется особая осторожность для избежания потери точности.

Выбор линейных базисных функций Ψ^i (рис. 1.16) задает линейную интерполяцию решения искомого θ на каждом треугольнике. Так, например, если функция θ принимает значения $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ в вершинах треугольника (рис. 1.16), то внутри него

$$\theta(x, y) = \theta_1 L_1(x, y) + \theta_2 L_2(x, y) + \theta_3 L_3(x, y), \quad (1.39)$$

где $L_i(x, y)$ — соответствующие части функций Ψ^i на данном треугольнике:

$$L_i(x_j, y_j) = \delta_{ij}, \quad (1.40)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера; x_j, y_j — вершины треугольника. Каждая из этих функций принимает значение, равное 1 в i -й вершине треугольника, и 0 — в других (рис. 1.17).

Функции $L_i(x, y)$ ($i=1, 2, 3$) в (1.39) называются локальным базисом на треугольнике [165] или функциями формы [77].

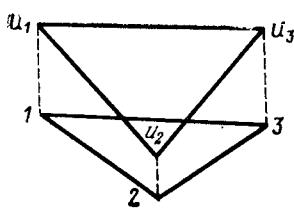


Рис. 1.16. Линейная интерполяция на треугольнике

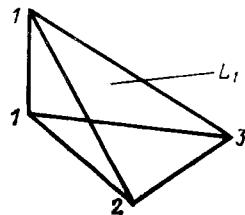


Рис. 1.17. Локальный базис на треугольнике (функция L_1)

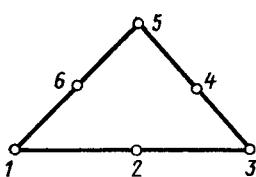


Рис. 1.18. Шестиузловой квадратичный треугольный конечный элемент

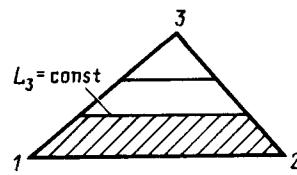


Рис. 1.19. L -координаты на треугольнике (линия $L_3 = \text{const}$)

Их явный вид в декартовых координатах

$$L_i = \frac{1}{2\Delta} (a_i + b_i x + c_i y), \quad (1.41)$$

где

$$a_i = x_2 y_3 - x_3 y_2, \quad b_i = y_2 - y_3, \quad c_i = x_3 - x_2, \quad (1.42)$$

а значения a_i , b_i , c_i при $i=2, 3$ получаются из (1.42) циклической перестановкой индексов; $\Delta = -1/2 [y_1(x_2 - x_3) + y_2(x_3 - x_1) + y_3(x_1 - x_2)]$ — площадь треугольника.

Для квадратичной интерполяции локальный базис будет состоять из шести функций, так как кроме узлов в вершинах появятся еще узлы на серединах сторон (рис. 1.18). Эти функции формы также удовлетворяют условиям (1.40). Их явная запись в декартовых координатах довольно громоздка; более естественно использовать так называемые L -координаты (L_1 , L_2 , L_3), представляющие локальные координаты на треугольнике, которые связаны с декартовыми x , y следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} x &= L_1 x_1 + L_2 x_2 + L_3 x_3, \\ y &= L_1 y_1 + L_2 y_2 + L_3 y_3, \\ 1 &= L_1 + L_2 + L_3. \end{aligned} \quad (1.43)$$

Каждая из L -координат принимает значение, равное 1 в одной из вершин треугольника, и обращается в 0 на противолежащей стороне.

На рис. 1.19 показаны линии постоянного значения координаты L_3 . Из геометрии следует, что величина L_3 равна отноше-

нию заштрихованной площади к площади всего треугольника, поэтому иногда L -координаты называют координатами площадей. Так как независимых координат на плоскости всего две, L -координаты линейно зависимы, их сумма всегда равна 1.

Обращая (1.43), можно выразить L -координаты через декартовы:

$$L_1 = \frac{1}{2\Delta} (a_1 + b_1x + c_1y), \quad L_2 = \frac{1}{2\Delta} (a_2 + b_2x + c_2y), \quad (1.44)$$

$$L_3 = \frac{1}{2\Delta} (a_3 + b_3x + c_3y),$$

где a_i , b_i , c_i определяются соотношениями (1.41). Сравнивая (1.44) с (1.41), получим, что линейный локальный базис L_i ($i=1, 2, 3$) совпадает с L -координатами.

Квадратичный локальный базис, который мы будем обозначать далее N_i , записанный в L -координатах, будет иметь вид

$$\begin{aligned} N_1 &= L_1(2L_1 - 1), & N_2 &= 4L_1L_2, & N_3 &= L_2(2L_2 - 1), \\ N_4 &= 4L_2L_3, & N_5 &= L_3(2L_3 - 1), & N_6 &= 4L_3L_1. \end{aligned} \quad (1.45)$$

Легко убедиться, что основное соотношение (1.40) для базиса (1.45) выполняется: каждая из функций базиса равна 1 в одном из узлов треугольника и обращается в нуль в остальных. Если в узлах функция θ принимает значение θ_i ($i=1, 2, \dots, 6$), то в любой точке треугольника

$$\theta(x, y) = \theta_i N_i. \quad (1.46)$$

Рекуррентный способ построения локального базиса n -й степени на треугольнике в L -координатах указан в [77]. При решении уравнений Навье—Стокса нами использовалась смешанная аппроксимация — линейная для давления и квадратичная для скоростей.

1.2.2. Составление уравнений конечных элементов

Для рассмотренной выше модельной задачи (1.30), (1.31) матрицу алгебраической системы уравнений (1.37) можно получить аналитически [77]. Определение элементов этой матрицы связано с вычислением следующих интегралов по треугольнику: в декартовых координатах

$$P_{rs} = \int_{\Delta} xy^s dx dy, \quad (1.47)$$

в L -координатах

$$Q_{abc} = \int_{\Delta} L_1^a L_2^b L_3^c dx dy. \quad (1.48)$$

С интегралами (1.47) удобно работать в системе координат центра тяжести треугольника. При $r+s < 6$ справедлива простая формула

$$P_{rs} = C_{r+s} \Delta (x_1^r y_1^s + x_2^r y_2^s + x_3^r y_3^s), \quad r + s < 6, \quad (1.49)$$

$$C_1 = 0, \quad C_2 = \frac{1}{12}, \quad C_3 = C_4 = \frac{1}{30}, \quad C_5 = \frac{2}{105}.$$

Для интегралов (1.48) можно использовать соотношение [77]

$$\int_{\Delta} L_1^a L_2^b L_3^c dx dy = \frac{a! b! c!}{(a+b+c+2)!} \cdot 2\Delta. \quad (1.50)$$

При реализации МКЭ на ЭВМ выписывание и программирование всех возможных вариантов интегралов достаточно громоздко. В таком случае, как и в нелинейной задаче, где аналитическое интегрирование невозможно, проводится численное интегрирование. Используются квадратурные формулы в L -координатах [77]:

$$\int_{\Delta} f(L_1, L_2, L_3) dx dy = \Delta \sum_{k=1}^n W_k f(L_1^k, L_2^k, L_3^k). \quad (1.51)$$

При их выборе обычно отдается предпочтение квадратурным формулам, точным для полинома данной степени. Например, для точного интегрирования полиномов до пятой степени достаточно использовать семиточечную квадратуру.

Составление матрицы алгебраической системы МКЭ является весьма важным при реализации МКЭ на ЭВМ. Рассмотрим два наиболее распространенных способа. Первый состоит в последовательном вычислении всех элементов матрицы. Учитывая локальность базисных функций, (1.38) можно переписать в виде

$$a_{ij} = \sum_k \int_{\Delta_k} \nabla \Psi^i \nabla \Psi^j dx dy + \int_{\Gamma_2^k} \alpha \Psi^i \Psi^j d\Gamma,$$

где Δ_k — треугольники, окружающие k -й узел. Подынтегральное выражение на каждом треугольнике можно выписать через соответствующие локальные базисные функции. Получим

$$a_{ij} = \sum_k \int_{\Delta_k} \nabla N_k^i \nabla N_k^j dx dy + \int_{\Gamma_2^k} \alpha N_k^i N_k^j d\Gamma. \quad (1.52)$$

Второй способ заключается в последовательном вычислении матриц интегралов на каждом треугольнике:

$$a'_{kl} = \int_{\Delta} \nabla N^k \nabla N^l dx dy + \int_{\Gamma_2} \alpha N^k N^l d\Gamma. \quad (1.53)$$

Элементы полной матрицы жесткости a_{ij} получаются суммированием по матрицам a'_{ik} , которые назовем матрицами жесткости отдельных элементов. Таким образом формируется «матрица жесткости» при решении больших задач фронтальным методом.

Для вычисления вектора b_i в правой части (1.37) имеются две аналогичные возможности.

1.2.3. Решение систем алгебраических уравнений МКЭ

Этап решения системы уравнений является одним из наиболее трудоемких при использовании МКЭ. Матрица системы уравнений МКЭ, как правило, содержит больше ненулевых элементов, чем аналогичная ей матрица, получаемая в МКР, что не допускает применения эффективных методов типа прогонки.

Ленточная структура матрицы позволяет использовать специальные «ленточные» алгоритмы, представляющие модификацию метода исключения Гаусса. В случае, если матрица системы имеет ленточную структуру с полушириной ленты m , количество операций можно существенно уменьшить. Суммарное количество операций при этом становится $O(m^2n)$ вместо $O(n^3)$ для полностью заполненной матрицы.

В методе конечных элементов полуширина ленты m определяется максимальной разностью номеров узлов внутри элементов $m = \max_i |n'_i - n'_j| + 1$, поэтому для минимизации затрат ЭВМ на решение задачи актуальным является поиск оптимальной нумерации узлов сетки. Если матрица системы (1.37) симметрична ($a_{ij} = a_{ji}$), то можно хранить в памяти ЭВМ только верхнюю половину матрицы. Необходимые объемы памяти в случае полной и ленточной матриц равны n^2 и mn соответственно. Для снижения требований на память при решении этим методом используется внешняя память.

При решении больших задач МКЭ ($n \approx 10^3 \div 10^4$) наиболее эффективным является фронтальный метод [231, 279]. Здесь также используется внешняя память, однако проведение процесса исключения Гаусса параллельно с формированием матрицы системы позволяет существенно уменьшить число обменов с внешней памятью и сократить физическое время решения задачи. Эквивалентом ширины ленты в этом методе является ширина фронта, для уменьшения которой необходимо оптимизировать нумерацию элементов сетки. Для двумерных задач МКЭ величина $m \sim \sqrt{n}$.

Для оптимизации номеров элементов и узлов разработан и реализован алгоритм OPTIME [66], реализующий наилучший из существующих [69] методов. Для большинства задач ширина ленты (фронта) после оптимизации уменьшается в 2—5 раз, сокращая время счета от 4 до 25 раз. Тем не менее вопросы более эффективного решения систем алгебраических уравнений МКЭ (равно как и вопросы конструирования матриц МКЭ, допускаю-

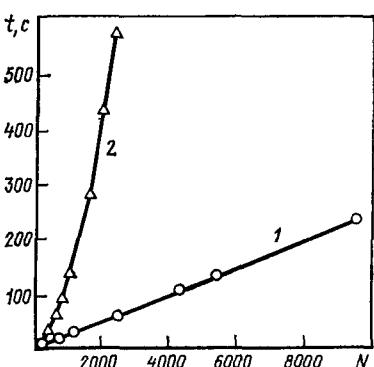


Рис. 1.20. Сравнение эффективности решения уравнения эллиптического типа многосеточным методом (1) [124] и фронтальным методом (2) (пакет LAPLACE [147])

щих эффективное обращение) являются одними из наиболее актуальных. Обзор современных прямых методов решения систем алгебраических уравнений и тексты программ для ЭВМ приведены в [69].

В последнее время быстро прогрессирует техника решения

систем уравнений МКЭ с помощью итерационных методов. В отличие от описанных выше прямых методов с вычислительной сложностью (ВС) $O(n^2)$ в ряду итерационных методов разработаны эффективные блочно-релаксационные методы в подпространствах [96], многосеточные методы, имеющие ВС = $O(n)$, и комбинации методов неполного разложения с методами типа сопряженных градиентов, имеющие ВС = $O(n^{5/4})$.

Многосеточные методы, которые предложены Р. П. Федоренко в 1961 г. [171, 172] для МКР и обобщены для МКЭ для областей простой формы в работах [8, 274] (см. также [244]), реализованы нами для задач МКЭ в областях сложной геометрической формы. Численные эксперименты, проведенные для уравнений эллиптического типа на подробных сетках, как показано на рис. 1.20, дают выигрыш в 50—500 раз по сравнению с традиционными подходами [124]. Это делает реальным решение с помощью МКЭ задач механики вязкой жидкости даже на ЭВМ средней производительности [176].

1.2.4. Генерация конечно-элементной сетки

Важным этапом в реализации МКЭ является процедура автоматического построения сетки³. В области x_1, x_2 вводится исходная сетка криволинейных восьмиузловых четырехугольников, которые мы будем называть суперэлементами (рис. 1.21). Через $P_i = P(x_{1i}^S, x_{2i}^S), i = 1, 2, \dots, 8$ обозначим узлы в суперэлементе S . При помощи отображения

$$x_1(\xi, \eta) = x_{1i}^S \varphi_i(\xi, \eta), \quad x_2(\xi, \eta) = x_{2i}^S \varphi_i(\xi, \eta) \quad (1.54)$$

квадрат Q переводится в S . Построенная в Q равномерная сетка отображается в криволинейную сетку суперэлемента S . При этом расположение точек P_i на сторонах (см. рис. 1.21) позволяет осу-

³ Различные подходы к решению этой задачи рассмотрены нами в [147]. Наиболее простые и эффективные методы приведены в работах [157, 211].

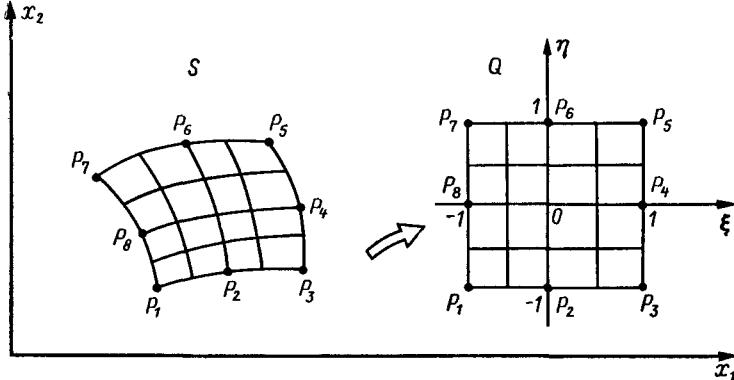


Рис. 1.21. Суперэлемент в области G и его образ в координатах (ξ, η)

ществлять локальное сгущение сетки. Преобразование (1.54) остается взаимно-однозначным, если расстояние между серединами и угловыми узлами суперэлемента не менее $\frac{1}{4}$ длины стороны [279].

Привлекательной особенностью МКЭ является возможность аддитивной генерации сетки, отслеживающей поведение решения, что и было реализовано в [147]. После генерации сетки проводится оптимальная перенумерация узлов и элементов [66].

1.2.5. Уравнения Навье—Стокса в приближении Буссинеска

Для применения МКЭ двумерные уравнения Навье—Стокса в приближении Буссинеска (1.4) записываются в естественных переменных в следующем безразмерном виде:

$$\begin{aligned}
 U_t - \frac{1}{Re} \left(\Delta U - \frac{K}{r^2} U \right) + UU_r + VU_z + \frac{K}{r} W + p_r &= 0, \\
 V_t - \frac{1}{Re} \Delta V + UV_r + VV_z + p_z &= \frac{Gr}{Re^2} \theta + \frac{Gr_c}{Re^2} C, \\
 W_t - \frac{1}{Re} \left(\Delta W - \frac{K}{r^2} W \right) + UW_r + VW_z + \frac{K}{r} UW &= 0, \\
 U_{rr} + \frac{K}{r} U + V_z &= 0, \\
 \theta_t + U\theta_r + V\theta_z &= \frac{1}{Re Pr} \Delta\theta, \\
 C_t + UC_r + VC_z &= \frac{1}{Re Sc} \Delta C.
 \end{aligned} \tag{1.55}$$

Здесь U, V, W — радиальная, осевая и окружная компоненты вектора скорости в цилиндрической системе координат (r, z) ; $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{K}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — лапласиан скалярной функции;

$K=1$ для цилиндрической системы координат и $K=0$ для декартовой (во втором случае $W=0$ и координаты (r, z) заменяются на (x, y)).

Система уравнений (1.55) описывает течения вязкой жидкости в декартовой и цилиндрической системах координат в некоторой области G с границей Γ . Физическая постановка задачи, начальные и граничные условия в цилиндрической системе координат определяются в разд. 4.1.

Аппроксимацию уравнений (1.55) методом конечных элементов выполним на примере задачи о течении в плоской замкнутой области G с граничными и начальными условиями

$$\begin{aligned} U|_{\Gamma} &= U_{rp}, & V|_{\Gamma} &= V_{rp}, \\ U|_{t=0} &= U_0(x, y), & V|_{t=0} &= V_0(x, y). \end{aligned} \quad (1.56)$$

Давление определяется с точностью до постоянной, поэтому положим для определенности

$$p(x_0, y_0) = 0. \quad (1.57)$$

Приближенное решение задачи (1.55)–(1.57) в области G ищем в виде

$$U = U^l \Phi^l, \quad V = V^l \Phi^l, \quad p = p^m \Psi^m. \quad (1.58)$$

Здесь $\Phi^l(x, y)$ и $\Psi^m(x, y)$ — наборы линейно-независимых базисных функций, а коэффициенты U^l, V^l, p^m зависят только от времени. Применение метода Галеркина и ортогонализация невязки к базисным функциям Φ^k и Ψ^m приводят к системе уравнений

$$\begin{aligned} \int \left(U_t - \frac{1}{Re} \Delta U + U U_x + V U_y + p_x \right) \Phi^k dxdy &= 0, \\ \int \left(V_t - \frac{1}{Re} \Delta V + U V_x + V V_y + p_y \right) \Phi^k dxdy &= 0, \\ \int (U_x + V_y) \Psi^m dxdy &= 0. \end{aligned} \quad (1.59)$$

Применяя формулу Грина, учитывая граничные условия и подставляя (1.58) в (1.59), получим

$$\begin{aligned} \int \left[U'_t \Phi^l \Phi^k + \frac{1}{Re} U^l \nabla \Phi^l \nabla \Phi^k + (U U' \Phi_x^l + V U' \Phi_y^l + \right. \\ \left. + p^m \Psi_x^m) \Phi^k \right] dxdy &= 0, \end{aligned}$$

$$\int \left[V_t^l \Phi^l \Phi^k + \frac{1}{\text{Re}} V^l \nabla \Phi^l \nabla \Phi^k + (UV^l \Phi_x^l + VV^l \Phi_y^l + p^m \Psi_y^m) \Phi^k \right] dx dy = 0, \quad (1.60)$$

$$\int (U^l \Phi_x^l + V^l \Phi_y^l) \Psi^m dx dy = 0.$$

Для выбора типа аппроксимации скоростей и давления рассмотрим тензор напряжений, действующих в вязкой жидкости,

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} \right). \quad (1.61)$$

Его компоненты зависят от производных скорости и давления. С точки зрения однородности составляющих компонент видно, что для представления скорости следует использовать базис более высокого порядка, чем для давления; так, если Ψ^m — линейный базис, то Φ^l должен быть квадратичным. Если этого не делать, то для ряда задач получим несовместную систему уравнений [177]. Вернемся к системе (1.60), представив ее в виде

$$\begin{aligned} m^{lk} U_t^l + c^{lk} U^l + d_1^{mk} p^m &= 0, \\ m^{lk} V_t^l + c^{lk} V^l + d_2^{mk} p^m &= 0, \\ e_1^{lm} U^l + e_2^{lm} V^l &= 0, \end{aligned} \quad (1.62)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} m^{lk} &= \int \Phi^l \Phi^k dA; \\ c^{lk} &= \int \left(U \Phi_x^l \Phi^k + V \Phi_y^l \Phi^k + \frac{1}{\text{Re}} \nabla \Phi^l \nabla \Phi^k \right) dA; \\ d_1^{mk} &= \int \Psi_x^m \Phi^k dA; \quad d_2^{mk} = \int \Psi_y^m \Phi^k dA; \\ e_1^{lm} &= \int \Phi_x^l \Psi^m dA; \quad e_2^{lm} = \int \Phi_y^l \Psi^m dA; \quad dA = dx dy. \end{aligned} \quad (1.63)$$

Рассмотрим вопрос об интегрировании уравнений по времени. Обозначив через \mathbf{X} вектор неизвестных U^l, V^l, p^m , запишем (1.62) в матричном виде:

$$\mathbf{M} \mathbf{X}_t + \mathbf{K} \mathbf{X} = 0. \quad (1.64)$$

Исторически сложившиеся названия матриц \mathbf{M} и \mathbf{K} — «матрица массы» и «матрица жесткости». В случае нелинейных гидродинамических уравнений $\mathbf{K} = \mathbf{K}(U, V)$. Для интегрирования (1.64) по времени наиболее естественна простая конечно-разностная дискретизация

$$\frac{1}{\Delta t} \mathbf{M} (\mathbf{X}^{n+1} - \mathbf{X}^n) + \mathbf{K} [\gamma \mathbf{X}^{n+1} + (1 - \gamma) \mathbf{X}^n] = 0. \quad (1.65)$$

При $\gamma=0,5$ получается схема типа Кранка—Никольсона, при $\gamma=1$ — полностью неявная схема. Так как матрица \mathbf{M} не является диагональной, явных схем при рассматриваемом подходе в МКЭ не получается.

Отметим, что расчет в переменных U, V, p обычно приводит при использовании МКР к различным трудностям, связанным как с конструированием разностных схем, так и с аппроксимацией граничных условий. При использовании МКЭ многие из них преодолеваются единообразно, и возможно обобщение метода на трехмерный случай, хотя трудности решения системы уравнений конечных элементов по-прежнему остаются.

После определения полей U и V нахождение функции тока с помощью МКЭ осуществляется путем решения уравнения Пуасона

$$\Delta\psi = \omega, \quad \omega = V_x - U_y, \quad \psi|_r = \psi_0. \quad (1.66)$$

Применяется квадратичная аппроксимация для ψ : $\psi = \Psi^t \Phi^t$. Обычная процедура приводит к системе линейных алгебраических уравнений

$$a^{kl} \Psi^l = f^k,$$

где $a^{kl} = \int \nabla \Phi^k \nabla \Phi^l dx dy$; $f^k = \int (U^l \Phi_y^l - V^l \Phi_x^l) dx dy$. Полученное поле ψ используется для построения картины течения по линиям тока.

Следует отметить, что при реализации МКЭ для формирования «матрицы жесткости» и вектора правой части элемента удобно ввести понятие подматрицы и подвектора. Это связано с тем, что в каждом треугольнике имеются два типа узлов — вершины, в которых определены U, V и p , и узлы на серединах сторон, в которых определены только U и V . Таким образом, с каждым элементом связаны 15 неизвестных: 6, 6 и 3, т. е. размерность матрицы жесткости элемента равна 15.

Вектор \mathbf{X} неизвестных на элементе удобно представить в виде

$$\mathbf{X} = [x_1, x_2, x_3]^T,$$

где индекс «т» означает транспонирование; x_m — «подвекторы» из пяти компонент, связанные с парой последовательных узлов:

$$x_m = \|U^l, V^l, p^m, U^{l+1}, V^{l+1}\|.$$

Матрица жесткости элемента представима в виде

$$a' = \begin{vmatrix} a^{11} & a^{12} & a^{13} \\ a^{21} & a^{22} & a^{23} \\ a^{31} & a^{32} & a^{33} \end{vmatrix}.$$

Здесь a^{mn} — «подматрицы» размером 5×5 , связанные с m -й парой узлов и имеющие вид

$$a^{mn} = \begin{vmatrix} c_1^{lk} & 0 & d_1^{mk} & c_1^{l+1,k} & 0 \\ 0 & c_2^{lk} & d_2^{mk} & 0 & c_2^{l+1,k} \\ e_1^{ln} & e_2^{ln} & 0 & e_1^{l+1,n} & e_2^{l+1,n} \\ c_1^{l,k+1} & 0 & d_1^{m,k+1} & c_1^{l+1,k+1} & 0 \\ 0 & c_2^{l,k+1} & d_2^{m,k+1} & 0 & c_2^{l+1,k+1} \end{vmatrix},$$

$m, n = 1, 2, 3, \quad l = 2m - 1, \quad k = 2n - 1,$ (1.67)

где величины $c_i = c$, d_i , e_i на элементе определяются (1.63) с заменой Φ^l на N^l и Ψ^m на L^m — квадратичные и линейные функции. Подвектор вектора правой части элемента имеет вид

$$b_m = \|b_1^k, b_2^k, 0, b_1^{k+1}, b_2^{k+1}\|^T, \quad (1.68)$$

где

$$\begin{aligned} b_1^k = & \int_{\Delta} \left[\left(\frac{2}{\tau} U - UU_x - VU_y - p_x \right) N^k - \right. \\ & \left. - \frac{1}{Re} (U_x N_x^k + U_y N_y^k) \right] dx dy, \end{aligned} \quad (1.69)$$

$$\begin{aligned} b_2^k = & \int_{\Delta} \left[\left(\frac{2}{\tau} V - UV_x - VV_y - p_y \right) N^k - \right. \\ & \left. - \frac{1}{Re} (V_x N_x^k + V_y N_y^k) \right] dx dy. \end{aligned}$$

Формулы (1.69) выписаны для $\gamma = 1/2$. Поля U , V , p , необходимые для вычисления элементов подматрицы и вектора правой части (1.64), берутся с предыдущего временного слоя или с предыдущей итерации.

Для стационарной задачи вектор правой части равен нулю.

1.2.6. Тесты МКЭ — течение несжимаемой жидкости в полости с движущейся границей

Данная задача рассматривается в качестве тестовой для сравнения с МКР. Границные условия для уравнений (1.56) имеют вид

$U = 1, \quad V = 0$ на движущейся границе,

$U, V = 0$ на неподвижных границах.

Полагается также $p(0, 0) = 0$. Стационарный режим ищется методом простой итерации при малых числах Рейнольдса ($Re < 50$) и как предел нестационарной задачи при больших числах Re .

В МКЭ используется равномерная конечно-элементная сетка, содержащая 15×15 узлов, 98 элементов; система алгебраических

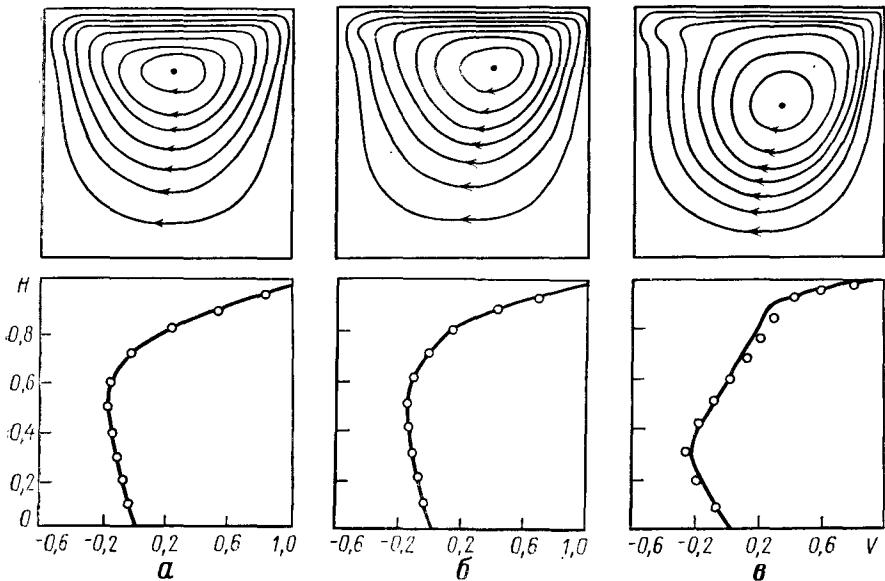


Рис. 1.22. Линии тока и профили скорости при $x=0,5$ в задаче о каверне
Точки — данные МКР, a — $Re=10$; b — $Re=100$, σ — $Re=400$

уравнений имеет 564 неизвестных. Для сравнения с МКР использовались данные работы [200] для $Re=400$ и [25] для $Re=10, 100$.

На рис. 1.22 даны результаты расчета течения — картины линий тока и профиль скорости в сечении $x=0,5$. При всех числах $Re=10, 100, 400$ наблюдается хорошее совпадение с МКР (МКР — для $Re=10, 100$ сетка 30×30 , второй порядок аппроксимации; для $Re=400$ — сетка 40×40 , второй порядок аппроксимации, направленные разности (1.13)).

1.2.7. Тесты тепловой конвекции в замкнутой области, подогреваемой сбоку

Для проверки эффективности МКЭ и сравнения с МКР рассмотрена задача о тепловой конвекции в квадратной области, подогреваемой сбоку (задача 1А в разд. 1.1). Границные условия имеют вид

$$\theta = 1, \quad x = 0, \quad 0 \leq y \leq 1,$$

$$\theta = 0, \quad x = 1, \quad 0 \leq y \leq 1,$$

$$\theta_n = 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad y = 0, 1,$$

$$U, V = 0 \text{ на всей границе}, \quad p = 0 \text{ при } x, y = 0.$$

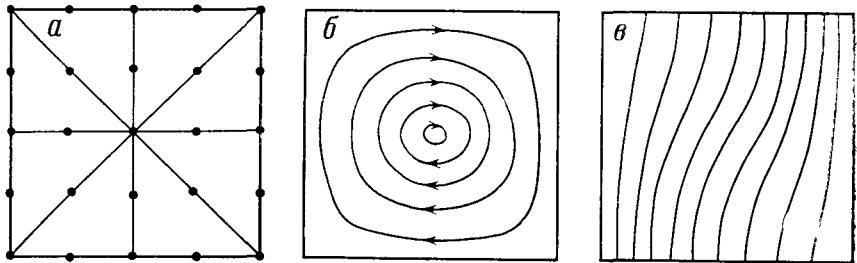


Рис. 1.23. Задача о тепловой конвекции для $\text{Ra} = 10^3$

a — сетка; *б* — линии тока; *в* — изотермы

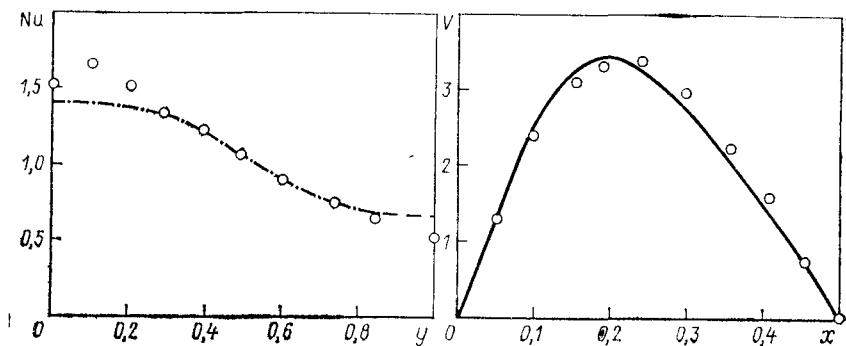


Рис. 1.24. Зависимость местного числа Нуссельта Nu от y и профиль вертикальной скорости V в сечении $y=0,5$ для $\text{Gr}=10^3$

Точки — данные МКЭ

Для сравнения результатов с решением МКР были использованы данные [25, 58, 63, 64].

На рис. 1.23 представлены результаты расчета тепловой конвекции при $\text{Gr}=10^3$, $\text{Pr}=1$. Сетка, используемая в расчетах по МКЭ, содержала 8 элементов, 25 узлов. Однако даже на такой грубой сетке картина течения воспроизводится правильно, что видно из рис. 1.24, где распределение местного числа Нуссельта сравнивается с результатами по МКР. Отличия наблюдаются только в окрестности $y=0$, отличия по интегральному потоку тепла для МКЭ и МКР составляют $\sim 4\%$ (1,14 и 1,10 соответственно).

Сравнение профиля скорости в сечении $y=0,5$ с МКР (см. рис. 1.24) обнаруживает небольшие расхождения в положении максимума скорости; форма профиля и максимальная величина скорости очень близки. Результаты расчетов при $\text{Gr}=10^4$, $\text{Pr}=1$ показаны на рис. 1.25. Здесь в МКЭ применялась более подробная сетка, состоящая из 72 элементов, 169 узлов. Хорошо согласуется и местное число Nu на стенке (рис. 1.26). Сравнение

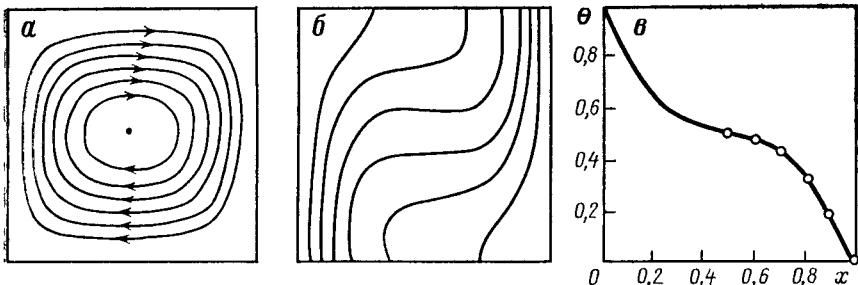


Рис. 1.25. Задача о тепловой конвекции для $\text{Ra} = 10^4$

a — линии тока; *б* — изотермы, *в* — профиль температуры ($y=0,5$, точки — данные МКЭ)

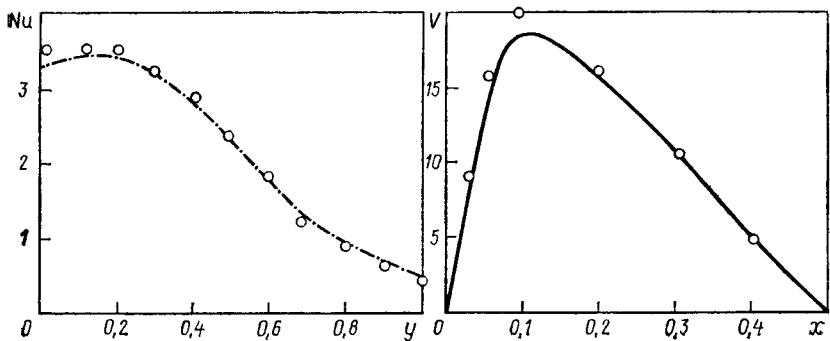


Рис. 1.26. Местный поток тепла на боковой стенке $\text{Nu}(y)$ и профиль вертикальной скорости $V(x)$ в сечении $y=0,5$ для $\text{Gr} = 10^4$

Точки — данные МКЭ

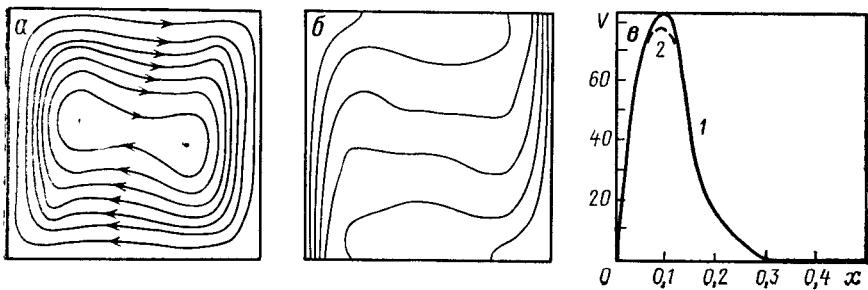


Рис. 1.27. Задача о тепловой конвекции для $\text{Ra} = 10^5$

a, *б* — то же, что на рис 1.25; *в* — профиль скорости V ($y=0,5$, 1 — данные МКЭ, 2 — МКР)

Таблица 1.3. Значения некоторых параметров МКЭ и МКР в задаче о тепловой конвекции (квадратная область, подогреваемая сбоку)

Метод	Gr	Pr	Сетка	Количество итераций	Временной шаг τ	Время расчета, мин	\overline{Nu}
МКЭ	10^3	1	5×5	3	—	0,5	1,14
МКР	10^3	1	17×17	100	10^{-3}	1,6	1,10
МКЭ	10^4	1	13×13	4	—	5	2,37
МКР	10^4	1	17×17	140	10^{-3}	2,2	2,36
МКЭ	10^5	1	13×13	5	—	6	5,17
МКР	10^5	1	17×17	200	10^{-3}	3,2	5,30

профилей скорости в сечении $y=0,5$ (см. рис. 1.26) показывает, что МКЭ дает несколько завышенные значения этих характеристик. Отметим, что похожие данные получены и в работах [264, 279]. Аналогичные результаты получены и при $Gr=10^5$ (рис. 1.27).

Время расчета по МКЭ для стационарного режима тепловой конвекции ненамного превышает затраты по МКР (5,0 и 2,2 мин соответственно для $Gr=10^4$), причем при малых числах Gr это время по МКЭ меньше, чем по МКР (0,5 и 1,6 мин для $Gr=10^3$). Сопоставление МКЭ и МКР по ряду параметров дано в табл. 1.3. Анализируя таблицу, можно сделать вывод, что МКЭ может успешно использоваться для расчетов тепловой конвекции при умеренных числах Gr, причем затраты МКЭ на эти расчеты сравнимы с МКР.

Исследования для $Gr=1,5 \cdot 10^5$ и различных чисел Pr проведены в работе [197], где сравниваются четыре метода: 1) МКЭ в переменных U, V, p, θ ; 2) МКЭ в ω, ψ, θ ; 3) МКР в ω, ψ, θ ; 4) МКР в U, V, p, θ . Авторы [197] делают вывод, что наилучшей в рассмотренных примерах является программа, использующая МКЭ в переменных U, V, p, θ . Дополнительные тесты МКЭ и МКР, выполненные в применении к моделированию гидродинамики и тепломассобмена при выращивании монокристаллов методом Чохральского (см. разд. 4.1), подтверждают эффективность применения МКЭ для этого класса задач.

Глава 2

УСКОРЕНИЕ РАСЧЕТОВ И ОБРАБОТКА ЧИСЛЕННЫХ РЕАЛИЗАЦИЙ

Численное решение нестационарных уравнений Навье—Стокса при больших числах Рэлея, как правило, осуществляется на пределе возможностей вычислительной техники, имеющейся у пользователя. Поэтому перспективы ускорения расчетов на современных многопроцессорных ЭВМ представляют значительный интерес для рассматриваемого класса задач.

Вместе с тем связанная с прогрессом численных методов и ЭВМ возможность моделирования сложных пространственно-временных структур конвекции ставит на одно из первых мест проблему графической и статистической обработки численных реализаций. Средства графической обработки должны обеспечивать оперативный вывод любых характеристик конвекции на телевизионный экран, работу в диалоге, изготовление твердых копий, съемку кинофильмов.

Анализ нерегулярных численных решений нестационарных уравнений Навье—Стокса, в том числе установление адекватности результатов математического моделирования реальным данным об объекте, может быть осуществлен лишь для некоторых статистических характеристик. При этом погрешности, которые вносятся в окончательные результаты при их недостаточно тщательной статистической обработке, могут быть такого же порядка, что и погрешности аппроксимации при построении дискретной модели. Это приводит к необходимости усовершенствования как методов статистической обработки, так и соответствующего программного обеспечения.

В данной главе описаны методы ускорения расчетов и методы обработки численных реализаций уравнений Навье—Стокса. Эти вопросы разрабатывались авторами книги и их коллегами в Институте проблем механики АН СССР параллельно с развитием методов численного решения.

В разд. 2.1 показан опыт применения в задачах конвективного тепло- и массообмена специального процессора конвейерного типа — матричного модуля для ЭВМ ЕС-1055М производства комбината «Роботрон» (ГДР). Для эффективного применения таких процессоров требуется учет специфики задачи и знание принципа их работы, в противном случае можно не только не достичь ускорения, но и замедлить выполнение расчета. Поэтому важное значение имеет обобщение результатов испытаний различных схем. Анализ этих результатов позволяет заранее

предсказать возможности ускорения расчетов в зависимости от параметров схемы и структуры программы.

В разд. 2.2 описана система графической обработки результатов, а в разд. 2.3 даны статистические характеристики численных реализаций и алгоритмы их расчета. Сведения о разработанном в Институте проблем механики АН СССР программном обеспечении методик ускорения расчетов и обработки излагаются в гл. 6 (разд. 6.3—6.5).

2.1. КОНВЕЙЕРНАЯ ОБРАБОТКА ДАННЫХ. ПРИМЕНЕНИЕ МАТРИЧНОГО МОДУЛЯ ЭВМ ЕС-1055М В ЗАДАЧАХ КОНВЕКТИВНОГО ТЕПЛО- И МАССООБМЕНА

Одним из способов повышения быстродействия ЭВМ является создание многопроцессорных устройств. Они могут быть организованы по принципу либо параллельного, либо конвейерного выполнения операций.

В последние годы появился ряд специализированных процессоров, подключаемых к ЭВМ серии ЕС, организованных по конвейерному принципу, которые позволяют на порядок увеличить быстродействие ЭВМ. Одним из таких процессоров является матричный модуль (МАМО) производства комбината «Роботрон», ГДР [95, 181], подключаемый к ЭВМ ЕС-1055М, который был введен в эксплуатацию в ИПМ АН СССР в 1983 г. Согласно описанию [95] МАМО имеет скорость вычислений 2,5 млн операций в секунду над числами с плавающей запятой. Иными словами, он способен повысить быстродействие ЭВМ ЕС-1055М в 10—15 раз.

Однако первые попытки опробовать его на простейшей задаче решения двумерного уравнения теплопроводности в прямоугольной области по неявной разностной схеме методом переменных направлений (сетка 100×100 узлов) дали лишь незначительное (в 1,5—2 раза) увеличение скорости счета. Поэтому пришлось провести исследование, имевшее целью выявить причины столь малого эффекта, определить круг задач и алгоритмов, в которых можно достигнуть потенциальной производительности МАМО, а также наметить направление работ по созданию специальных методов расчета задач гидромеханики, тепло- и массообмена, приспособленных к особенностям МАМО.

2.1.1. Ускорение счета в конвейерных вычислителях

В обычных (последовательных) ЭВМ арифметические вычисления осуществляются центральным процессором (ЦП), который последовательно читает из оперативной памяти (ОП) команды, расшифровывает их, извлекает из ОП операнды, производит заданные в коде операции команд арифметические вычисления,

осуществляет запись результатов в ОП. Переход к выполнению следующей команды осуществляется после завершения всех вычислительных операций предыдущей.

Алгоритм каждой арифметической операции можно разложить на ряд последовательно выполняемых шагов. Так, сложение двух чисел в форме с плавающей запятой можно представить в виде последовательности: 1) выравнивание порядков; 2) сложение мантисс; 3) округление результата; 4) нормализация результата.

В каждом из перечисленных шагов алгоритма также можно выделить несколько шагов.

На выполнение каждого шага алгоритма арифметической операции ЦП затрачивает определенное время. Общее время выполнения заданной арифметической операции равно сумме времен, затрачиваемых на каждый из шагов. Время выполнения каждого шага зависит от скоростных характеристик элементной базы, на основе которой построена данная ЭВМ. При выполнении одной и той же арифметической операции над элементами массивов чисел размерностью L ЦП затрачивает время $T = Lt$, где t — время выполнения одной операции.

В конвейерных процессорах, предназначенных для выполнения одной и той же арифметической операции над массивами чисел, для каждого шага алгоритма арифметической операции изготавливают свой подпроцессор. Каждый подпроцессор получает исходную информацию от своего предшественника и после выполнения своей части алгоритма передает результат преемнику. Работа конвейерного процессора организуется так, что в его подпроцессорах одновременно обрабатываются группы различных элементов массивов. Кроме того, подпроцессоры конструируются так, чтобы затрачиваемое каждым из них на обработку время было одинаковым.

Рассмотрим затраты времени на выполнение арифметической операции над массивами чисел размерностью L конвейерным процессором, состоящим из n подпроцессоров с временем выполнения каждого шага алгоритма τ (время такта конвейера). После начала обработки пройдет промежуток времени $(n-1)\tau$ (время заполнения конвейера), прежде чем первая группа операндов «достигнет» последнего «рабочего места» конвейера. После этого момента конвейерный процессор начнет в каждый промежуток времени τ выдавать один результат заданной арифметической операции. Общее время обработки массивов длиной L составит $T_0 = (n-1)\tau + Lt$.

Как правило, конвейерные процессоры строятся для выполнения ряда арифметических операций: сложение, вычитание, умножение и т. д. Кроме того, обычно предусматривается возможность выполнения операций над числами с различной длиной мантиссы. Поэтому перед началом каждой арифметической операции необходимо провести «наладку» процессора, что занимает определенное время t_c (стартовое время). Таким образом, общее

время обработки будет равно

$$T = [t_c + (n-1)\tau] + L\tau. \quad (2.1)$$

Конвейерные процессоры изготавляются на основе той же элементной базы, что и ЭВМ, поэтому их скоростные характеристики практически одинаковы. Однако время выполнения одного шага алгоритма арифметической операции τ , как правило, на порядок меньше времени выполнения всей операции на ЦП. Поэтому при достаточно большой длине массивов, над элементами которых производится заданная арифметическая операция, их обработка на конвейерном процессоре пройдет быстрее, чем на ЦП.

Подсчитаем коэффициент ускорения счета k . Для этого разделим время, затрачиваемое ЦП на обработку группы массивов длиной L , на время, затрачиваемое конвейерным процессором. В полученном выражении разделим числитель и знаменатель на $L\tau$:

$$k = \frac{k_\infty}{1 + M/L}, \quad (2.2)$$

где $k_\infty = t/\tau$ — коэффициент ускорения при бесконечной длине обрабатываемых массивов, $M = n - 1 + t_c/\tau$ — количество тактов конвейера, затрачиваемое на «наладку» и заполнение конвейера. Величину M можно назвать длиной массива половинной производительности конвейерного процессора, так как при $L = M$ коэффициент ускорения равен $k_\infty/2$. Из (2.2) видно, что конвейерные процессоры выгодно применять при $L \gg M$, а при $L < M/(k_\infty - 1)$ можно получить даже проигрыш по сравнению с ЦП.

Формула (2.2) справедлива для идеализированного случая, когда сравниваются времена выполнения одиночной команды конвейерного процессора и программы для ЦП, выполняющей те же действия над массивами чисел. В программе для ЦП кроме команд, реализующих заданную арифметическую операцию, присутствуют команды, управляющие окончанием цикла и приращением индекса, на выполнение которых затрачивается определенное время. В машинах серии ЕС это обычно одна команда. В программе, реализующей почлененное сложение двух массивов чисел с записью результатов в ОП, на команду окончания цикла в ЭВМ ЕС-1055 затрачивается 20% времени выполнения всех команд цикла. Таким образом, время выполнения на ЦП какой-либо одиночной арифметической операции над массивами чисел можно представить в виде суммы t_a — времени собственно арифметической части тела цикла и t_y — времени выполнения команд управления циклом. Определим k_∞ как отношение $(t_a + t_y)/\tau$.

Рассмотрим теперь зависимость коэффициента ускорения от длины массивов для фрагмента программы, содержащей цикл, в котором выполняются m арифметических операций. Если эту же последовательность операций выполнить группой из m ко-

манд конвейерного процессора, то коэффициент ускорения будет иметь вид

$$k = \frac{(m t_a + t_y) L}{m (M\tau + L\tau)} = \frac{k_\infty \epsilon_y}{1 + M/L}, \quad (2.3)$$

где

$$\epsilon_y = 1 - \frac{t_y}{t_a + t_y} \left(1 - \frac{1}{m} \right). \quad (2.4)$$

Из (2.3) и (2.4) видно, что с увеличением количества арифметических вычислений в теле цикла эффективность конвейерного процессора падает.

При программировании с использованием конвейерного процессора иногда приходится реорганизовывать расположение массивов обрабатываемых чисел в ОП с тем, чтобы расположить их так, чтобы можно было употреблять команды конвейерного процессора. С точки зрения алгоритма задачи такая реорганизация является лишней, и при программировании этой же задачи на ЦП она не производится. Снижение эффективности конвейерного процессора за счет лишней вычислительной работы, необходимой для реорганизации массивов данных, можно также выразить формулой (2.3). При этом вместо ϵ_y необходимо подставить произведение ϵ_v и отношения числа арифметических действий в теле цикла при однократном его выполнении m к общему числу команд конвейерного процессора, выполняющих реорганизацию массивов данных (l команд) и арифметические вычисления алгоритма (m команд): $\epsilon_v \rightarrow \epsilon_v m / (l+m) = \epsilon_y \epsilon_p$.

Действуя аналогично, можно получить формулу для вычисления коэффициента ускорения счета при использовании конвейерного процессора в случаях, когда используются команды, оперирующие с массивами разной длины, и когда часть вычислений реализуется с помощью ЦП:

$$k = \frac{k_\infty (\epsilon_y \epsilon_p + \epsilon_u)}{1 + k_\infty \epsilon_u + M/\bar{L}}, \quad (2.5)$$

где $\epsilon_u = m_u / (m_k \bar{L})$; m_u — количество вычислений, реализованных на ЦП; m_k — количество команд конвейерного процессора в программе; $\bar{L} = \sum m_i L_i / \sum m_i$ — среднеарифметическая длина массивов данных; m_i — количество выполненных команд, оперирующих с массивами длиной L_i . Например, если в программе имеется 10 команд для операций над массивами длиной 10^4 и одна команда для операций над массивами длиной 100, но в цикле с числом повторений 1000, то $\bar{L} \approx 200$.

Зная характеристики M и k_∞ конвейерного процессора и проанализировав алгоритм задачи по формуле (2.5), можно оценить эффективность его применения (до написания программы и ее прогонов) и принять решение об использовании конвейерного процессора. Характеристики M и k_∞ необходимо определять

экспериментально на модельных или реальных задачах при обычной для вычислительного центра загрузке ЭВМ. Паспортных данных конвейерного процессора, в которых указывается стартовое время его команд и время такта, а также данных о времени выполнения отдельных команд ЦП недостаточно, так как на величины M и k_∞ влияют система программирования на языках высокого уровня, скорость обмена с ОП, задержки обмена с ОП, возникающие из-за конкуренции устройств ЭВМ по обращению с ОП при мультипрограммном режиме ее эксплуатации.

Система программирования на языках высокого уровня перед каждой выполняемой командой конвейерного процессора позволяет вставлять в программу ряд команд ЦП, которые осуществляют ее настройку (например, передают ей информацию об адресах начала массивов, их размерности и т. п.). Тем самым к «штатному» времени старта команд конвейерного процессора фактически прибавляется время выполнения этих команд ЦП. Если конвейерный процессор является внешним устройством, то штатному времени старта команд необходимо добавлять время, затрачиваемое операционной системой ЭВМ на его запуск.

Оперативная память ЭВМ выдает потребителю или принимает на хранение информацию за конечное время. При этом время выдачи—приема информации зависит от ее формата: 1 байт информации выдается—принимается быстрее, чем слово длиной 4 байта. Поэтому если суммарное время выдачи—приема ОП, необходимое для чтения операндов и записи результата данной команды конвейерного процессора, больше времени его такта, то конвейерный процессор будет работать со скоростью обмена с ОП. При мультипрограммной работе ЭВМ к оперативной памяти могут одновременно обращаться ЦП, конвейерный процессор, каналы ввода—вывода. Вследствие этого могут возникать дополнительные задержки в выдаче—приеме информации ОП, которые еще более увеличиваются как время такта конвейерного процессора, так и время выполнения команд ЦП.

Разные команды конвейерного процессора имеют различные значения k_∞ , так как время выполнения соответствующих команд ЦП различно в зависимости от выполняемой операции: например, умножение двух чисел выполняется дольше, чем сложение. В алгоритмах разных классов задач различна частота употребления команд конвейерного процессора: в одних алгоритмах часто употребляются команды почлененного сложения и умножения массивов, в других большой вес составляют команды быстрого преобразования Фурье, в третьих—команды линейной алгебры. Поэтому величины M и k_∞ , необходимые пользователю для оценки эффективности применения конвейерного процессора, зависят еще и от класса задач.

Все эти обстоятельства диктуют необходимость экспериментального определения характеристик конвейерного процессора

на конкретной вычислительной установке в зависимости от класса решаемых задач и их алгоритмов и даже от времени суток. Формула (2.5) удобна для оценок эффективности применения конвейерного процессора в данной задаче, но неудобна для экспериментального определения M и k_∞ путем сравнения времен выполнения задач, программы которых составлены с применением команд конвейерного процессора и без него. Неудобство заключается в том, что величина предельной эффективности при больших \bar{L} не равна k_∞ . Более удобной для этих целей будет формула, полученная из (2.5) путем введения так называемой эффективной длины обрабатываемых массивов данной программы. Эффективная длина L_s вводится так, чтобы формула для k имела вид (2.2). Для этого приравниваем

$$(1 + k_\infty \varepsilon_u + M/\bar{L}) / (\varepsilon_y \varepsilon_p + \varepsilon_u) = 1 + M/L_s.$$

Отсюда получаем

$$L_s = \bar{L} \frac{\varepsilon_y \varepsilon_p + \varepsilon_u}{1 + [1 + (k_\infty - 1) \varepsilon_u - \varepsilon_y \varepsilon_p] L/M}, \quad (2.6)$$

$$k = \frac{k_\infty}{1 + M/L_s}. \quad (2.7)$$

Для экспериментального определения характеристик конвейерного процессора в данной среде и на данном классе задач необходимо составить программы модельных задач данного класса с использованием команд конвейерного процессора и без них. Модельные задачи должны быть простыми, чтобы легко можно было написать и отладить эти программы, но должны включать в себя основные черты их алгоритмов. При этом желательно иметь хотя бы одну пару программ, в которых ε_u равно нулю (это можно сделать искусственно, удалив соответствующие операторы из обеих программ). Затем устраиваются их прогоны при различных \bar{L} с измерением времени выполнения. Путем анализа программ определяются значения ε_y , ε_p , ε_u . Затем строится график, по оси ординат которого откладывается отношение времен выполнения соответствующей пары программ, а по оси абсцисс — значение L_s . По экспериментальным точкам проводится кривая, по двум точкам которой, отстоящим достаточно далеко друг от друга по оси L_s , можно найти экспериментальные значения M и k_∞ .

2.1.2. Общая характеристика матричного модуля ЭВМ ЕС-1055М

Матричный модуль (МАМО) ЭВМ ЕС-1055М производства комбината «Роботрон» (ГДР) представляет собой блок центрального процессора [95, 181]. Запуск МАМО осуществляется командой ЦП с определенным кодом операции без обращения к операционной системе. Время старта МАМО-команды колеблет-

ся в пределах 40—80 мкс. МАМО включает в себя конвейерные процессоры: умножитель (У), сумматор (С) и тестовое устройство (Т). Время такта конвейерных процессоров МАМО составляет 385 нс. Интерфейс между МАМО и ОП позволяет производить за время такта обмен одним двойным словом.

Конвейерные процессоры МАМО могут соединяться в следующие цепи: УС, УТ, СТ, УСТ. Кроме этого, результаты на выходе из одного конвейера могут направляться на вход его самого или предыдущего конвейера. Благодаря этому МАМО может вычислять значения полиномов, скалярные произведения векторов, коэффициенты преобразования Фурье и т. д.

Организуют работу конвейеров МАМО специальные микропрограммы, хранящиеся в ОП при его активном состоянии. При выполнении конкретной микропрограммы МАМО переписывает ее из ОП в свою внутреннюю память. Номер микропрограммы указывается в адресной части МАМО-команды. В адресной части МАМО-команды указываются также адреса ОП двух блоков: блока параметров (РАВ) и блока сообщений (МИВ). В блоке РАВ располагается информация, необходимая для настройки микропрограмм: адреса объектов обработки, их характеристики, заказ на дополнительные действия при обработке объектов и т. д. В блок МИВ МАМО записывает информацию о завершении работы данной микропрограммы.

Матричный модуль обрабатывает данные в виде чисел с плавающей запятой, которые могут быть трех форматов: короткого — длиной в слово (4 байта), длинного — двойное слово (8 байтов) и расширенного — два двойных слова (16 байтов).

Объектами, с которыми оперирует МАМО, являются константы, ряды и поля. Константа или скаляр характеризуются их адресами в ОП и форматом. Рядом называется упорядоченная последовательность чисел, расположенная с некоторого начального адреса в ОП и характеризующаяся форматом, способом хранения, шагом и длиной.

Матричный модуль обрабатывает ряды, хранящиеся в ОП в одном из двух видов: неиндексированном и индексированном. В первом случае все элементы ряда явно записываются в память и для его хранения необходимо отвести объем памяти (в байтах), равный длине ряда, умноженной на длину формата в байтах. При индексированном способе хранения в ОП записываются только ненулевые элементы ряда. В этом случае ряд состоит из заголовка ряда, адрес которого является в этом случае начальным адресом ряда, и последовательно (без промежутков) расположенных в ОП блоков. В заголовке указываются адрес первого блока и увеличенный на единицу индекс последнего ненулевого компонента ряда. В блоке в первых четырех полусловах записываются возрастающие индексы четырех ненулевых элементов отрезка ряда, за которыми следуют четыре значения этих элементов. Таким образом, блок занимает $8+4F$ байтов памяти, где $F=\{4|8|16\}$ в зависимости от формата данных.

Элементы, индексы которых не записаны ни в одном блоке, МАМО «считает» равными нулю. Если число ненулевых элементов не кратно четырем, то излишняя часть индексного поля последнего блока должна заполняться значениями индекса, не меньшими, чем значение индекса последнего ненулевого элемента. При индексированном способе хранения ряда величина шага ряда игнорируется МАМО.

Шагом ряда при неиндексированном способе хранения называется промежуток в ОП между элементами ряда, выраженный числом элементов того же формата плюс единица. Так, в ряде короткого формата с шагом 4 между двумя соседними элементами ряда в ОП будут находиться 3 слова, не относящиеся к данному ряду. Шаги рядов могут быть равными: ± 1 , ± 2 , ± 4 , ± 8 , однако ряд, являющийся результатом МАМО-команды, может иметь шаг ± 1 . Это ограничение делает весьма проблематичным использование других возможных шагов в программах. В случае отрицательного шага ряда начальным адресом является адрес его последнего элемента, а обработка ведется от конца к началу. Длиной ряда является количество его элементов (включая и число нулевых элементов, не записанных в память при индексированном способе хранения). МАМО обрабатывает ряды длиной $1 \leq L \leq 32\,768$.

Простейшим аналогом ряда при неиндексированном способе хранения является одномерный массив в языках Фортран, ПЛ-1, Алгол.

Полем называется совокупность нескольких (k) рядов с одинаковыми характеристиками. МАМО обрабатывает поля с числом рядов $1 \leq k \leq 32\,768$. При неиндексированном хранении рядов адресом поля является адрес первого элемента первого ряда при положительном шаге и последнего элемента первого ряда при отрицательном шаге. Шагом поля M называется количество элементов, разделяющее один ряд от другого. На величину шага поля наложено следующее ограничение: $1 \leq M \leq 32\,768$. Простейшим аналогом поля в языках высокого уровня при неиндексированном хранении является двумерный массив. Если число рядов поля равно величине шага составляющих его рядов, то шаг поля может быть равным единице. В этом случае поле аналогично двумерному массиву $A(N, L)$, где N — шаг ряда и одновременно число рядов поля, L — число элементов в ряде. В этом случае командами обработки рядов МАМО обрабатывает двумерный массив $A(N, L)$ по строкам (в представлении Фортрана).

При индексированном хранении адресом поля является заголовок его первого ряда. В этом случае заголовки рядов поля располагаются в памяти без промежутков. В памяти должны быть представлены заголовки всех рядов поля, включая и ряды, целиком состоящие из нулей. Для ряда, целиком состоящего из нулей, значение индекса последнего ненулевого элемента должно равняться нулю.

Результатом выполнения МАМО-команды может быть скаляр или ряд. В случае индексированного ряда результата пользователь должен для его блоков зарезервировать в ОП определенное пространство. Однако при определении длины этого пространства можно сделать ошибку: число ненулевых компонент ряда результата может превысить сделанную пользователем оценку. Для того чтобы не произошло записи в область ОП, предназначенную для иной информации, задается адрес защиты, которым является адрес байта, непосредственно следующего за зарезервированным под хранение блоков ряда пространством ОП.

Исходными данными МАМО-команды могут быть поле (П), ряд (Р), константа (скаляр) (С). Для одной МАМО-команды в зависимости от ее алгоритма, как правило, можно задать до трех различных операндов: ПРС, РРС, ПР, РР, РС, Р (в некоторых командах необходимо задание ряда промежуточных результатов). МАМО не накладывает ограничений на соответствие характеристик operandов, участвующих в операции. Например, при поэлементном сложении двух рядов они могут различаться способом хранения, форматом, шагами и длиной. Если длины рядов x_i и y_i различны (соответственно L_1 и L_2), то ряд результата z_i получится длиной $\max(L_1, L_2)$, причем ряд с меньшей длиной внутри МАМО расширяется нулями. Например, при сложении двух рядов суммы компонент вычисляются по формуле

$$z_i := \text{if } (i \leq \min(L_1, L_2)) \text{ then } x_i + \\ + y_i \text{ else begin if } (L_1 > L_2) \text{ then } x_i \text{ else } y_i \text{ end.}$$

Сама операция может проводиться аппаратурой МАМО в формате, отличающемся от форматов operandов и формата результата. Если в алгоритме команды участвуют два конвейера (умножитель и сумматор), то форматы, в которых необходимо производить умножение и сложение, также могут быть различными. Например, при поэлементном сложении двух рядов, элементы которых представлены в коротком формате, сложение можно производить в длинном формате. При этом мантиссы элементов дополняются нулями до нужной длины, а затем производится собственно сложение. При таком способе можно получить более точные значения сумм, так как при выравнивании порядков у меньшего числа не теряются разряды.

Аппаратура МАМО перед проведением заданной операции может изменять знаки элементов объектов operandов и после операции у элементов результирующего объекта. Возможны следующие изменения знаков: $+a_i$, $-a_i$, $|a_i|$ и $-|a_i|$. Благодаря этой возможности МАМО «умеет» проводить вычисления $a_i - b_i$, $a_i + |b_i|$, $a_i - |b_i|$, $|a_i \pm b_i|$ и т. д.

Информация о характеристиках объектов (адреса, форматы, способы хранения, шаги рядов, их длины и т. д.), о форматах, в которых следует производить операции умножения и сложе-

ния, о необходимых изменениях знаков у элементов каждого объекта указывается в определенных полях блока параметров, на который ссылается в адресной части МАМО-команда. В блок параметров пользователь может занести информацию о дополнительных действиях, которые МАМО должен выполнить одновременно с вычислениями.

Имеются четыре группы таких действий — четыре оптации. Наибольший интерес при программировании алгоритмов представляет оптация № 2. При ее «включении» к арифметическим конвейерам подключается тестовое устройство. Тестовое устройство при определенном виде дополнительной информации, также заносимой в блок параметров, может искать один из экстремумов ($\max z_i$, $\max |z_i|$, $\min z_i$, $\min |z_i|$) в получившемся ряде результата или осуществлять замену значений элементов ряда результата нулем или значением «предела», адрес которого занесен в определенное поле блока параметров.

Например, при положительном значении «предела» E тестовое устройство может выполнять одну из следующих замен в ряде результата:

$$\begin{aligned} z_i &:= \text{if } (|z_i| < E) \text{ then } 0 \text{ else } z_i, \\ z_i &:= \text{if } (z_i < E) \text{ then } 0 \text{ else } z_i, \\ z_i &:= \text{if } (|z_i| > E) \text{ then } \text{sign}(z_i) * E \text{ else } z_i, \\ z_i &:= \text{if } (z_i > E) \text{ then } E \text{ else } z_i. \end{aligned}$$

Если тестовому устройству указан поиск экстремума, то после окончания операции МАМО записывает в пятое слово блока сообщений относительный адрес (в байтах) положения экстремального значения, а в следующее полуслово — индекс. Более подробные сведения о возможностях тестового устройства можно найти в [181].

2.1.3. Эффективность МАМО в задачах тепло- и массообмена

Для определения характеристик M и k_∞ МАМО в задачах гидромеханики, тепло- и массообмена были проведены испытания по изложенной выше методике на следующих модельных задачах.

1. Решение уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \Delta \theta \quad (2.8)$$

в двумерных и трехмерных областях с прямолинейными или плоскими границами и граничными условиями первого рода. Испытывались неявные и явные разностные схемы, являющиеся частными случаями схем (1.13) и (1.15).

2. Решение уравнения

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(d(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \right) + P - Q\theta, \quad (2.9)$$

где $d(\theta) = 1 + a\theta + b\theta^2 + c\theta^3$; P и Q — константы; n равно 2 или 3. Границы областей прямолинейные или плоские, граничные условия первого рода. Испытывались неявные разностные схемы типа (1.13).

3. Решение методом установления уравнения Пуассона

$$\Delta \psi = \omega \quad (2.10)$$

в двумерной прямоугольной области с граничными условиями первого рода. Испытывалась итерационная неявная разностная схема (1.18).

4. Решение системы уравнений Навье—Стокса в приближении Буссинеска для тепловой конвекции в переменных вихрь—функция тока

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + U \frac{\partial \omega}{\partial x} + V \frac{\partial \omega}{\partial y} = \Delta \omega + \text{Gr} \frac{\partial \theta}{\partial x},$$

$$\Delta \psi = \omega, \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + U \frac{\partial \theta}{\partial x} + V \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{1}{\text{Pr}} \Delta \theta,$$

$$U = \partial \psi / \partial y, \quad v = -\partial \psi / \partial x$$

в прямоугольной области с граничными условиями первого рода для θ и ψ и граничными условиями (1.29) для вихря. Испытывалась симметричная явная схема (1.15) при $\xi_1 = \xi_2 = 0$ для уравнений переноса вихря и температуры в сочетании с марш-методом (программа FHS11 комплекса ELLDEC [15]) для решения уравнения Пуассона (см. разд. 1.1).

При реализации явных разностных схем МАМО-подпрограммами (МП) (см. разд. 6.3) двумерные и трехмерные массивы, хранящие значения искомых функций в узлах разностной схемы, заменялись эквивалентными одномерными. Решение на одном временном шаге вычислялось по разностным формулам всюду, включая и точки границы. Это давало возможность применять МП с длинами рядов, почти равными общему числу узлов. При этом во всех внутренних точках получался верный результат. В тех точках границ области, где происходило вычисление по разностным формулам, значения исправлялись согласно граничным условиям после основных вычислений с помощью команд ЦП или команд МАМО с длинами рядов, равными числу узлов на одной из сторон области.

С точки зрения алгоритма задачи вычисления по разностным формулам в точках границы области и последующее исправление решения в этих точках являются лишними: ε_p в (2.6) не равно нулю и пропорционально отношению числа узлов, лежа-

щих на границе, к общему числу узлов разностной сетки. Точно так же $\epsilon_{\text{п}} \neq 0$, так как часть вычислительной работы производится в программах с помощью ЦП. Для трехмерного случая средняя длина рядов \bar{L} меньше используемой в основных вычислениях, так как часть МП много раз запускается с короткой длиной. Все эти обстоятельства снижают эффективную длину в двумерных задачах на 10—20%, в трехмерных — примерно в 10 раз.

При реализации неявных разностных схем (1.13) (см. разд. 1.1) с использованием метода переменных направлений прогоночные коэффициенты и решения вычислялись с помощью МП сразу для всех отрезков разностной сетки, перпендикулярных одной из сторон или граней области. Для осуществления тех же действий в других направлениях массивы решения предварительно реорганизовывались с помощью МП образования вектора (ряда) из строки матрицы. В двумерном случае эта реорганизация равносильна транспонированию матрицы. В трехмерном случае массив решения $U(M, N, K)$ заменялся эквивалентным двумерным $U1(M*N, K)$ и осуществлялось его транспонирование. Такая операция эквивалентна превращению массива $U(M, N, K)$ в массив $U(K, M, N)$. Реорганизации массивов в ОП — лишние в алгоритме.

При вычислениях прогоночных коэффициентов и решения в трехмерном случае с помощью векторных операций МАМО с векторами длиной $M*N$, $K*M$ и $N*K$ приходится вычислять лишние коэффициенты и решения на боковых гранях расчетной области. Исправлять неправильные значения искомой функции в граничных точках здесь нет необходимости, так как при прогонке в другом направлении после реорганизации «испорченные» грани станут граничными для прогоночных коэффициентов и решения. Однако сами вычисления прогоночных коэффициентов и решения в этих точках уменьшают значения ϵ_p .

В формулах вычисления прогоночных коэффициентов есть операция деления, не поддерживаемая аппаратурой МАМО. В одной части испытаний деление осуществлялось командами ЦП. В другой части операция деления осуществлялась вычислением отрезка ряда разложения $(1/x_0)(1 + (x - x_0)/x_0)^{-1} \approx \approx (1/x_0)(1 - \Delta x + \Delta x^2 - \dots)$, где x_0 — некоторое среднее значение делителя, x — текущее значение делителя (при условии $\Delta x = (x/x_0 - 1) \ll 1$, которое для некоторых из перечисленных задач соблюдается). При сравнении коэффициентов ускорения двух реализаций операции деления оказалось, что выполнение деления на ЦП снижает эффективность МАМО в 2 раза.

В задаче 2 коэффициенты уравнения $d(\theta)$ и разностных уравнений можно вычислять МП с длинами векторов (рядов), равными общему числу узлов разностной сетки. Однако, поскольку имеется гораздо больше выполнений МП с существенно более короткими длинами рядов, \bar{L} вырастает незначительно (для данной задачи).

Для наиболее простых модельных задач были составлены по две программы: на языке Фортран для ЦП и на языке Фортран с помощью МП. Для более сложных модельных задач программы для ЦП не составлялись. Вместо составления программ для ЦП использовалась программа, написанная с использованием МП, которая при прогонах использовала подпрограммы, имитирующие работу МП на ЦП. Такие подпрограммы-имитаторы были составлены на Фортране, имели такие же имена и формальные параметры, как и соответствующие МП.

Рассмотрим временные затраты трех программ: 1) «истинной» программы, написанной на Фортране (ПФ), содержащей цикл с числом повторений L_a , в котором m арифметических операций; 2) программы, реализующей тот же алгоритм с помощью $m+l$ МП (ПМА), оперирующих с рядами длиной L_a , и 3) программы, в которой вместо МП работают подпрограммы-имитаторы (ПМИ):

$$t_{\text{ПФ}} = (mt_a + t_y)L_a, \quad t_{\text{ПМА}} = (m+l)\tau(M+L_a), \\ t_{\text{ПМИ}} = (m+l)[(t_a + t_y)L_a + t_n],$$

где t_n — время входа—выхода в подпрограмму-имитатор.

Обозначим k' коэффициент ускорения, измеренный при прогонах ПМА и ПМИ, равный $t_{\text{ПМИ}}/t_{\text{ПМА}}$, $M' = t_n/\tau$. Тогда коэффициент $k = t_{\text{ПФ}}/t_{\text{ПМА}}$ можно вычислить по формуле

$$k = \frac{\epsilon_y \epsilon_p}{1 + M'/(k_\infty L_a)} k', \quad (2.12)$$

где ϵ_y , ϵ_p и k_∞ имеют тот же смысл, что и в формулах (2.2) — (2.7). Для задач, в которых были составлены ПФ, проводились оба вида испытаний, т. е. прогоны ПФ, ПМА и ПМИ. В этих испытаниях были оценены значения M'/k_∞ . Оказалось, что $M'/k_\infty \approx 10$. Отсюда следует, что при $L_a > 50$ можно пользоваться более простой формулой:

$$k = k' \epsilon_y \epsilon_p. \quad (2.13)$$

Результаты испытаний эффективности МАМО на модельных задачах гидромеханики, тепло- и массообмена показаны на рис. 2.1. В обозначениях точек в подписи под рисунком первая цифра означает номер задачи; второй символ — применявшуюся разностную схему: Я — явная, Н — неявная схема (метод переменных направлений); третий — размерность пространства: 2 — двумерное, 3 — трехмерное; четвертый символ указывает на программу для ЦП, с которой сравнивалась МАМО-программа: Ф — программа составлена для ЦП на Фортране, И — вместо МАМО-подпрограмм подключены их имитаторы, а вычисление k осуществлялось по формуле (2.13). Следующая за этим символом группа цифр указывает на число узлов (или диапазон числа узлов) разностной сетки вдоль одной из сторон области (вдоль всех сторон одинаковое число точек). Наконец, послед-

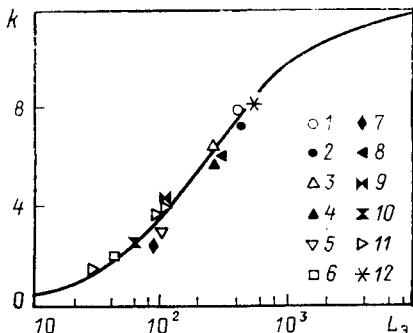


Рис. 2.1. Зависимость коэффициента ускорения счета при использовании МАМО от эффективной длины рядов в задачах гидромеханики, тепло- и массообмена, полученная при испытаниях на модельных задачах

Кривая — функция $k=12/(1+250/L_3)$; точки:
 1 — 1Я3Ф50, 2 — 1Я3И50, 3 — 1Я3Ф22, 4 — 1Я3И22, 5 — 1Н3Ф50Ц, 6 — 1Н2Ф100Ц, 7 — 2Н3И50Ц, 8 — 2Н3И50М, 9 — 2Н2И101М, 10 — 2Н2И101Ц, 11 — 3Н2Ф33 — 121Ц, 12 — 4Я2И101

ний символ указывает на способ выполнения операции деления в МАМО-программе: Ц — деление на ЦП, М — деление путем вычисления отрезка ряда. В последнем случае использовалась МАМО-подпрограмма для расчета ряда значений полинома.

Из сравнения точек, имеющих, кроме спецификаций «Ф» и «И», одинаковые прочие спецификации, видно, что косвенные испытания, т. е. испытания с пересчетом коэффициента ускорения по формуле (2.13), дают удовлетворительные совпадения значений k со значениями, полученными в прямых испытаниях.

Для большинства задач осуществлялись десятки прогонов обоих вариантов программ при разной загрузке ЭВМ и вычислялось среднее значение k , которое и нанесено на рис. 2.1. По экспериментальным точкам проведена кривая $k=12/(1+250/L_3)$, которая соответствует предельной эффективности на данном классе задач $k_\infty=12$ и времени старта МАМО-подпрограмм, равному 250 тактам.

Таким образом, анализ результатов показывает, что наибольший эффект ускорения получается для явных схем в двумерных и трехмерных задачах, а для неявных разностных схем — в трехмерных задачах при реализации операции деления с помощью МП.

Для неявных разностных схем методы решения систем алгебраических уравнений, хорошо приспособленные для обычных последовательных процессоров, оказались малоподходящими к системе команд МАМО. Главные причины плохой эффективности МАМО в этих алгоритмах заключаются в слишком большом времени старта (M/L_3 велико) МАМО-команд и МАМО-подпрограмм, а также в ограничениях на величину шага рядов, приводящих к необходимости лишних вычислений — транспонирования массивов искомых функций. Отсюда следует необходимость разработки таких алгоритмов решения этих систем, которые позволили бы вести вычисления при больших длинах рядов (например, итерационные методы). Это указывает разработчикам спецпроцессоров пути улучшения их характеристик: уменьшение времени старта команд, снятие ограничений на величины шагов ряда, важность операции деления и т. д.

Выполненные исследования не исчерпывают все возможности МАМО ($\sim 10^6$ различных модификаций команд). Поэтому предстоит большая работа по освоению специфических приемов программирования и разработке новых алгоритмов, способных реализовать потенциальные возможности специальных процессоров этого типа.

2.2. ГРАФИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ЧИСЛЕННЫХ РЕАЛИЗАЦИЙ

При проведении вычислительного эксперимента, как правило, получают большой объем числовой информации, которую необходимо представить в наглядной форме. Заранее не всегда ясно, что именно и как должно быть выведено на графики, диаграммы и т. п. Так, в численном моделировании выращивания полупроводниковых структур методом жидкостной эпитаксии (см. разд. 4.3) при исследовании влияния различных параметров на характеристики эпитаксиальных слоев строились и анализировались до 25 различных графиков в каждом варианте расчета (каждый вариант характеризуется набором значений входных параметров). Для задачи, описанной в разд. 4.3, было проведено 35–40 вариантов расчетов. Таким образом, для изучения данной задачи пришлось построить порядка 500–900 рисунков различной сложности. В других задачах, вошедших в эту книгу, количество построенных и анализировавшихся рисунков того же порядка.

Хотя графическое представление имеет небольшую точность, оно позволяет наглядно представить изменения переменных по координатам, параметрам задачи и времени. Кроме того, если на график наносятся результаты экспериментального исследования той же задачи или результаты решения, полученные другими авторами или методами, то такое сравнение выглядит весьма убедительно. Идеализированная технологическая схема проведения этой части научно-исследовательской работы может выглядеть так:

- а) при подготовке к расчетам исследователь кроме программы расчета, исходных данных и плана расчетов вводит в постоянную память ЭВМ данные экспериментальных и теоретических исследований других авторов, с которыми в дальнейшем предполагается проводить сравнение;
- б) при проведении расчетов данные (параметры, исходные переменные задачи и результаты расчета каждого варианта) записываются на магнитные носители в виде архива численных реализаций;
- в) в соответствии с целями исследования выводятся необходимые графики на графический дисплей. При построении графиков на них наносятся экспериментальные точки и теоретические кривые других авторов. К просмотру графиков на дисплее

исследователь может привлекать своих коллег и руководителя для обсуждения. Этот этап многократно повторяется до получения удовлетворительных результатов. Обычно эта часть работы начинается задолго до окончания расчетов;

г) по достижении цели исследования полученные рисунки выводятся на графопостроитель для последующей публикации.

Из сказанного ясно, что процесс анализа и графического вывода результатов представляет собой довольно трудоемкую творческую работу, для выполнения которой необходимо иметь соответствующую аппаратуру и программное обеспечение. Для вывода графической информации могут использоваться графопостроители, графические дисплеи, устройства для вывода на кинопленку и т. п. Программное обеспечение для всех этих устройств должно базироваться на достаточно мощном комплексе графических подпрограмм. Наиболее распространены комплексы программ «Графор» [9] и «Атом'85» [94], в которых насчитываются сотни подпрограмм различного назначения. К их достоинствам, кроме широкого функционального разнообразия, относятся достаточно полная документированность и локализация привязки к конкретным графическим устройствам в самом нижнем уровне подпрограмм.

Существенное ускорение всей процедуры вывода и анализа графической информации может быть достигнуто при использовании интерактивных графических дисплейных систем, однако такие системы недостаточно разработаны и распространены. В Институте проблем механики АН СССР разработана аппаратура и программное обеспечение, в которых реализованы многие функции подобных систем. Это графическая система «Динамика» и диалоговая проблемно-ориентированная система «Буэр». Исследователь, использующий их, получает и качественно новые возможности: просмотр нестационарных процессов на экране дисплея в режиме кино, съемку кинофильма, существенно большую гибкость анализа графической информации.

2.2.1. Графическая система «Динамика»

Система «Динамика» [50] представляет собой комплекс аппаратных и программных средств, предназначенных для вывода графического изображения на экраны черно-белых и цветных бытовых телевизоров, устройство мозаичной печати, покадровой съемки кинофильмов с экранов телевизоров.

Аппаратная часть системы построена на основе устройства ввода данных с перфоленты ЕС-6022, блоков памяти микро-ЭВМ «Электроника-60» и созданных в ИПМ АН СССР блоков формирования и регенерации изображения на экране бытового телевизора. Все детали, необходимые для изготовления аппаратуры системы «Динамика», доступны. Контроллер графической системы — модифицированное устройство ЕС-6022 — соединяется с каналами ЕС ЭВМ стандартным интерфейсом.

Для создания изображения на экранах применен растровый принцип построения изображения с растром 256×256 точек. Образом изображения в памяти ЭВМ при его создании графическими программами является карта-бит. После создания рисунка в памяти ЭВМ его карта-бит передается обычными операциями ввода-вывода в соответствии с заданным адресом в один из блоков памяти контроллера системы «Динамика». По окончании операции ввода-вывода начинается регенерация изображения на экране телевизора, подключенном к данному блоку памяти, и выдается сигнал, способный запустить кинокамеру. Разворотка ведется по 256 бит на одну строку, причем светлым точкам соответствует единица.

В одном контроллере имеется 16 блоков памяти, соответствующих 16 адресам устройств. Для создания изображения на экранах цветных телевизоров используются три карты-бит, по одной для каждого из опорных цветов — красного, синего и зеленого. Для вывода изображения на экран «расходуется» три адреса устройств. Таким образом, к одному контроллеру системы может быть подключено либо 16 черно-белых телевизоров, либо 5 цветных.

Программная часть системы «Динамика» построена на основе комплекса «Графор». Для «рисования» в карте-бит, хранящейся в памяти ЭВМ, создана специальная подпрограмма нижнего уровня DPLOT. Эта программа осуществляет связь комплекса с аппаратной частью системы «Динамика». Кроме подпрограммы DPLOT, написаны подпрограммы вывода подготовленных карт-бит. Эти подпрограммы могут соединять подготовленный к демонстрации рисунок с так называемым фоновым рисунком. Аппарат фоновых рисунков позволяет экономить процессорное время при подготовке и просмотре серии однотипных графиков, в которых есть неизменяемая часть (например, оси координат, подписи и т. д.).

В процессе выполнения одной программы программная часть системы «Динамика» может неоднократно переключать комплекс «Графор» с работы, направленной на подготовку карты-бит для демонстрации на экране телевизора, на работу, направленную на подготовку команд графопостроителя, и обратно. Эта возможность позволяет исследователю, работающему в режиме СРВ (система разделения времени операционной системы ЭВМ типа ЕС), отдать приказ и получить «твердую копию» рисунка на графопостроителе, не прибегая к повторному запуску программы (для этого в операторах DD процедуры LOGON должны быть описаны и устройства «Динамики», и графопостроитель). Твердую копию исследователь может также получить на устройстве мозаичной печати (модифицированный «Консул-2112») с помощью специальной подпрограммы. Качество такой копии хуже, чем на графопостроителе, но скорость ее получения намного выше: 20 с для рисунка любой сложности.

На рис. 2.2, а показано одно из изображений, выведенных на экран бытового черно-белого телевизора в графической дисплейной системе «Динамика». При создании изображения использовались подпрограммы комплекса «Графор», позволяющие построить линии равного уровня, написания символов и другие. Видно, что криволинейные изолинии из-за небольшой разрешающей способности раstra аппроксимируются кусками прямых, параллельных осям x и y дисплея. Однако быстрота получения рисунка, позволяющая за небольшой промежуток времени вывести на экран и проанализировать большое количество рисунков, частично компенсирует этот недостаток.

На рис. 2.2, б показана «твёрдая копия» изображения на экране графического дисплея, полученная на модифицированном устройстве мозаичной печати «Консул-2112». Здесь видны те же недостатки изображения. Они, однако, также окупаются скоростью получения «твёрдой копии».

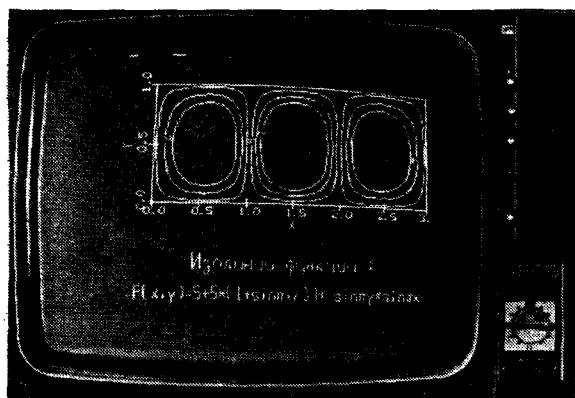
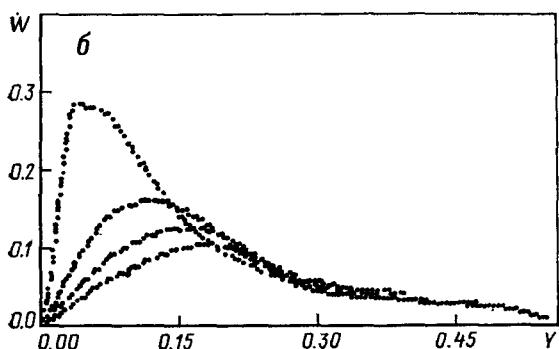


Рис. 2.2.
Пример
вывода изображения
с помощью
графической
дисплейной системы
«Динамика»

*а — вывод
на черно-белый
телевизор;*



*б — «твёрдая
копия экрана»,
полученная
на модифицированном
устройстве
мозаичной печати
«Консул-2112»*

2.2.2. Диалоговая проблемно-ориентированная графическая обработка численных реализаций

Использование диалоговых графических систем [178] для обработки численных реализаций позволяет существенно ускорить и упростить как процесс отбора и анализа необходимой информации, так и процесс представления результатов в виде оформленных графиков и рисунков. Для анализа результатов моделирования процессов гидродинамики и тепломассообмена были созданы проблемно-ориентированные диалоговые системы программы, запускаемые в режиме СРВ.

Изложим основные принципы, применяющиеся при разработке и использовании графических диалоговых программ. Программы построены по принципу меню. После запуска программы она выводит на экран алфавитно-цифрового дисплея перечень возможных работ по обработке результатов и построению графиков. Цифрами в перечне указаны варианты ответов исследователя. Для обработки и построения графиков данные поступают из архива численных реализаций. Получив ответ исследователя, программа переходит к исполнению полученного «приказа». Если приказ означает нарисовать и показать на экране графического монитора график, то после выполнения этих действий на экран алфавитно-цифрового дисплея поступают вопросы о дальнейших действиях. Такими вопросами, как правило, бывают:

1. Уничтожить рисунок?
2. Сохранить его в фоновом массиве?
3. Создать твердую копию на устройстве мозаичной печати?
4. Создать твердую копию на графопостроителе?
5. Вернуться к исходной точке программы?

Программы для работы в диалоговом режиме легко модифицировать по мере возникновения новых потребностей по обработке результатов. Исследователь получает возможность быстро просмотреть сотни графиков, получить их копии на устройстве мозаичной печати или графопостроителе или запоминать в наборе данных на магнитном носителе в виде «следа пера» для неоднократного воспроизведения в последующем.

Остановимся более подробно на возможностях использовавшейся в разд. 2.3, 3.1 и 5.2 данной монографии диалоговой графической системы «Буэр», которая включает (см. разд. 6.6):

средства записи результатов расчетов сеточных задач на внешние носители в стандартизованном виде;

построение графиков, линий равного уровня и проекций для функций двух переменных, проекций поверхностей равного уровня для функций трех переменных;

проблемно-ориентированную обработку (в том числе статистическую (см. разд. 2.3 и 6.5)) и представление результатов для задач тепло- и массообмена;

редактирование и вывод графической информации в диалоговом режиме в архив данных, на цветной бытовой телевизор или монитор, устройство мозаичной печати для получения твердой копии изображения;

вывод графической информации в диалоговом режиме или подготовку графических данных на магнитной ленте для вывода на графопостроитель или устройство документирования на цветной кинофотопленке СОМ-340 [74].

Для оперативного вывода графической информации в системе «Буер» используются технические и программные средства телевизионной графической системы «Динамика» [50] (см. п. 2.2.1 и разд. 6.4).

Управление работой графических и проблемных программ в системе «Буер» организовано по принципу многоуровневого «меню функций» [178]. Вопросы, адресуемые пользователю, упорядочены в иерархическое дерево, в котором предусмотрен постоянный контроль степени детализации диалога. Диалог может быть весьма кратким, если используются стандартные параметры. Типичный набор действий заключается в чтении данных из архива решений, обработке этих данных (например, расчет среднего, дисперсии и т. д.) и выводе полученных результатов в графическом виде сначала на телевизионный монитор для предварительного анализа, а затем, при необходимости, после дополнительной обработки и редактирования на графопостроитель, устройство мозаичной печати или устройство вывода на кинофотопленку [74]. Диалоговые средства системы «Буер» функционируют в режиме СРВ [18] или в подсистеме диалоговой обработки (ПДО) системы виртуальных машин (СВМ) [159].

Для обеспечения вывода графического изображения на различные графические устройства (как векторного, так и растрового типа) в системе реализована концепция виртуального графического устройства с динамической перенастройкой для последовательного вывода на конкретные устройства, выбираемые в процессе диалога. Предусмотрен многократный переход с одного устройства на другие и обратно. Построение изображений производится при помощи графических программ [21], специальных программ системы «Динамика» [50], графических пакетов прикладных программ «Графор» [9] и «Атом'85» [94].

Проблемно-ориентированная обработка задач тепло- и массообмена включает средства для организации архива данных и анализа нестационарных процессов. При использовании алгоритмов статистической обработки в диалоговом режиме возникает проблема реорганизации данных, накапливаемых при расчетах в виде последовательности временных слоев, содержащих всю расчетную область (файл последовательного доступа), к времененным рядам в выбранных точках расчетной области (файл прямого доступа на магнитном диске с малым временем доступ-

па). Это необходимо для сокращения времени ожидания результатов обработки в процессе диалога. При оперативной памяти ЭВМ в сотни килобайт и объеме численной реализации нестационарного процесса в десятки мегабайт проблема реорганизации архива минимальными средствами, или «задача о лифте» по терминологии [90], становится нетривиальной. Для использования в системе «Буер» разработан алгоритм реорганизации архива числовых данных, близкий к теоретически оптимальному, требующий лишь однократного прочтения исходного архива.

Программа реорганизации архива и программы статистической обработки, включенные в диалоговую систему «Буер», описаны в разд. 2.3 и 6.5. При создании системы «Буер» была предусмотрена возможность подключения к ней программ обработки, созданных самим пользователем, т. е. предусмотрена возможность расширения «меню функций».

Опыт использования системы «Буер» для обработки численных реализаций в задачах тепло- и массообмена подтвердил высокую эффективность и удобство работы в диалоговом режиме.

2.3. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ЧИСЛЕННЫХ РЕАЛИЗАЦИЙ

При обработке результатов численного решения нестационарных уравнений конвекции (1.6)–(1.9) преследуются те же цели, что и при обработке физического эксперимента. Различия в обработке физического и численного экспериментов сокращаются по мере автоматизации физического эксперимента. Сохраняются, однако, существенные с точки зрения выбора алгоритмов обработки различия в пространственно-временной структуре данных. В физическом эксперименте, как правило, получают длительные временные ряды в малом числе пространственных точек, а в численном эксперименте, напротив,— короткие временные ряды в большом числе пространственных точек. Алгоритмы обработки должны отражать эти различия пространственно-временной структуры данных. При анализе численных реализаций гидродинамических процессов привлекаются как понятия статистической гидромеханики [110], так и приемы теории случайных процессов, анализа временных рядов [84], а при изучении перехода к стохастическому (турбулентному) режиму привлекаются понятия качественной теории дифференциальных уравнений [38]. Конкретный выбор оцениваемых статистических характеристик определяется проблемной задачей, необходимостью сопоставления данных численного моделирования с экспериментом и т. п.

Статистическая обработка необходима в тех случаях, когда моделируемое на ЭВМ течение жидкости приобретает нерегу-

лярный случайный характер. При критических значениях параметров (число Рэлея, число Рейнольдса) нерегулярное течение со временем перестает зависеть от начальных данных, устанавливаются средние значения полей скорости, температуры и др. Такой режим течения принято [110] называть турбулентным. С точки зрения статистических методов принципиально важна полная независимость средних значений от времени (дисперсия может зависеть лишь от приращения времени). В этом случае численная реализация, представляющая турбулентное течение, является стационарным случайным процессом. Таким образом, критерий стационарности четко сформулирован и может быть легко проверен по графикам зависимости среднего и дисперсии от времени. На основе этого критерия будем отличать турбулентный режим течения от переходного, не вполне установившегося режима. Для оценки статистических параметров численной реализации простым осреднением по времени численная реализация должна быть стационарным эргодическим процессом. Свойство эргодичности будем предполагать выполненным для статистических моментов первого, второго, третьего и четвертого порядков.

Первый шаг статистической обработки состоит в определении границы переходного и турбулентного (установившегося) режима течения по критерию стационарности. Выделенный таким образом участок численной реализации должен иметь достаточную длину для получения достоверных оценок статистических характеристик.

На следующем этапе осреднением по времени вычисляются величины

$$a_\alpha \doteq \bar{u}^\alpha \doteq \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N u_k^\alpha,$$

$$m_\alpha \doteq \overline{(u - \bar{u})^\alpha} \doteq \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (u_k - \bar{u}_k)^\alpha. \quad (2.14)$$

Здесь u_k — численная реализация оцениваемого стохастического процесса в момент времени t_k . Показатель степени α принимает значения 1, 2, 3, 4. Зная величины \bar{u}^α и $\overline{(u - \bar{u})^\alpha}$, можно построить состоятельные¹ и несмешенные² оценки статистических параметров численной реализации.

Статистические моменты первого (математическое ожидание) и второго (квадрат дисперсии) порядков оцениваются

¹ Вероятность сколь угодно малого отклонения оценки $\hat{\mu}$ статистического параметра по N точкам от истинного значения параметра μ при увеличении числа точек N стремится к нулю.

² Математическое ожидание оценки $\hat{\mu}$ равно истинному значению параметра μ .

по формулам

$$\mu_1 = a_1 \pm \sqrt{\mu_2/N}, \quad (2.15)$$

$$\mu_2 = \frac{N}{N-1} m_2 \pm \sqrt{\frac{1}{N} \left(\mu_4 - \frac{N-3}{N-1} \mu_2^2 \right)}. \quad (2.16)$$

Статистические моменты третьего и четвертого порядков оцениваются по формулам

$$\mu_3 = \frac{N^2}{(N-1)(N-2)} m_2, \quad (2.17)$$

$$\mu_4 = \frac{N(N^2 - 2N + 3)m_4 - 3N(2N - 3)m_2^2}{(N-1)(N-2)(N-3)}. \quad (2.18)$$

Моменты столь высокого порядка особенно чувствительны и могут применяться для зон, где пульсации течения жидкости минимальны (например, в пограничном слое у твердой стенки). Вместо моментов третьего и четвертого порядков чаще используют коэффициенты асимметрии и эксцесса

$$A = \mu_3/\mu_2^{3/2}, \quad E = \mu_4/\mu_2^2 - 3, \quad (2.19)$$

которые характеризуют отклонение распределения плотности вероятности изучаемого процесса от эталонного гауссова распределения. Формулы (2.16)–(2.18) применимы, если шаг дискретизации $\Delta t = t_k - t_{k-1}$ больше (или равен) интегрального масштаба времени L_u^t . Если $\Delta t < L_u^t$, то оценки моментов второго, третьего и т. д. порядков зависят от автокорреляционной функции изучаемого процесса. При численном моделировании шаг дискретизации Δt совпадает с шагом τ численного решения уравнений конвекции.

Имеющийся опыт статистического анализа численных реализаций [23, 254] показывает, что при достигнутом к настоящему времени уровне точности численного моделирования вместо формул (2.16)–(2.18) можно пользоваться приближенными соотношениями

$$\mu_2 \approx m_2, \quad \mu_3 \approx m_3, \quad \mu_4 \approx m_4. \quad (2.20)$$

В общем случае численная реализация представляет многомерное (скорость, температура, концентрация), многоразмерное (координаты, время) случайное поле. Совокупность функций корреляций этого случайного поля образует тензор второго ранга [110]. Дискретный аналог корреляционного тензора – совокупность двухточечных моментных функций [110]. На практике корреляционный тензор рассматривают в пространстве пониженной размерности и, зафиксировав координаты (x_0, y_0) , изучают корреляции по времени в точке:

$$R_u(x_0, y_0, t, \Delta t) = \int_0^\infty u(x_0, y_0, t) u(x_0, y_0, t + \Delta t) d(\Delta t). \quad (2.21)$$

Если выполняется условие $R_u(x_0, y_0, t, \Delta t) = R_u(x_0, y_0, \Delta t)$, то R_u есть обычная автокорреляционная функция, а ее фурье-преобразование есть временной спектр стационарного случайного процесса u .

Важная интегральная характеристика корреляционных свойств — интегральный масштаб времени (макромасштаб)

$$L_u^t = \frac{1}{R_u(0)} \int_0^T R_u(\Delta t) d(\Delta t). \quad (2.22)$$

Предел интегрирования в (2.22) выбирается из условия

$$R_u(x_0, y_0, T) = 0.$$

Макромасштаб L_u^t называют также эффективным временем корреляции. При малых интервалах корреляции Δt корреляционные свойства характеризуют микромасштаб λ_u^t , определенный через вторую производную корреляционной функции в нуле:

$$(\lambda_u^t)^{-2} = \frac{-1}{2R_u(0)} \left. \frac{\partial^2 R_u(\Delta t)}{\partial (\Delta t)^2} \right|_{\Delta t=0}. \quad (2.23)$$

По соотношениям, аналогичным (2.21), можно ввести пространственные корреляционные функции $R_{ux}(x, y_0, t_0, \Delta x)$ и функции взаимных корреляций $R_{uv}^t(x_0, y_0, t, \Delta t)$ двух случайных процессов u и v . Целесообразность введения этих функций и характеризующих их макро- и микромасштабов зависит от возможности их анализа, проблемной ориентации задачи, наличия экспериментальных данных для сопоставления.

Построение дискретных оценок статистических характеристик, введенных соотношениями (2.21)–(2.23), вообще говоря, не менее сложно, чем оценка статистических моментов (2.15)–(2.18). В настоящее время в пакете статистических программ (см. разд. 6.4) применяются приближенные соотношения типа простых формул (2.20).

При анализе турбулентных режимов течения широко используется оценка спектральной плотности пульсаций скорости, температуры и др. С методами расчета спектров можно ознакомиться в [84]. Для спектрального анализа численных реализаций, как показывает опыт [23, 254], лучше подходят методы, специально разработанные для коротких временных рядов (см. разд. 6.4).

При математическом моделировании турбулентных течений жидкости на основе полуэмпирических моделей турбулентности для анализа механизмов турбулентного переноса вычисляют отдельные составляющие баланса турбулентной энергии [5, 110]. В статистический пакет (см. разд. 6.4) включена специальная программа для расчета отдельных составляющих баланса турбулентной энергии по численным реализациям, получае-

мым при решении уравнений Навье–Стокса или уравнений конвекции (1.4).

В статистическом пакете предусмотрен расчет пульсаций скорости, температуры и др. ($U' = U - \bar{U}$, $\theta' = \theta - \bar{\theta}$, ...), турбулентных напряжений Рейнольдса $\overline{U'V'}$, турбулентного теплопереноса $\overline{U'\theta'}$, турбулентной вязкости $\nu_{\tau b} = -\overline{U'V'}/(\partial\bar{U}/\partial z)$, турбулентной температуропроводности $a_{\tau b} = -\overline{V'\theta'}/(\partial\bar{\theta}/\partial z)$, турбулентного числа Прандтля $\text{Pr}_{\tau b} = \nu_{\tau b}/a_{\tau b}$. Все характеристики вычисляются в каждой точке расчетной области и выдаются в виде графиков линий уровня и в виде одномерных графиков по горизонтальным и вертикальным разрезам.

Численную реализацию можно рассматривать как набор выходных характеристик некоторой динамической системы [38], которой соответствует фазовое пространство. Пусть в момент времени t_1 точка фазовой траектории определяется набором характеристик $(x_1, y_1, U_1, V_1, \theta_1)$. По полям скорости и температуры, известным в моменты времени t_1 , $t_2 = t_1 + \tau$ и т. д., можно восстановить всю фазовую траекторию отмеченной лагранжевой частицы по формулам

$$\begin{aligned} x_2 &= x_1 + (\tau/2) [U_1 + U(x_1 + U_1 \tau, y_1 + V_1 \tau)], \\ y_2 &= y_1 + (\tau/2) [V_1 + V(x_1 + U_1 \tau, y_1 + V_1 \tau)], \\ U_2 &= U(x_2, y_2), \quad V_2 = V(x_2, y_2), \quad \theta_2 = \theta(x_2, y_2). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Значения скорости $U(x_2, y_2)$, $U(x_1 + U_1 \tau, y_1 + V_1 \tau)$ и т. д. определяются по значениям скорости в узлах разностной сетки по интерполяционной формуле Лагранжа. В лабораторных экспериментах для визуализации траекторий частиц применяют алюминиевую пудру. На полученных в таких экспериментах фотографиях видны траектории частиц пудры за время экспозиции. Проекция (x, y) фазовой траектории лагранжевой частицы, рассчитанной по формулам (2.24), дает аналогичную картину. Еще более наглядно течение жидкости можно представить, выводя на кинопленку (см. разд. 6.5) с помощью системы «Динамика» траектории сразу нескольких лагранжевых частиц.

Исчерпывающей характеристикой фазового пространства является фазовый портрет, т. е. структура разбиения фазового пространства на подобласти с различным поведением фазовых траекторий. Характерные черты фазового портрета (например, замкнутые траектории) можно обнаружить по одной достаточно длинной фазовой траектории, которая с течением времени и изменением параметров процесса переходит из одной подобласти фазового пространства в другую.

Приведем перечень статистических характеристик, которые можно получить, обрабатывая численные реализации с помощью статистического пакета [23] (см. разд. 6.4):

1) начало участка обработки по установлению средних величин,

- 2) средние и дисперсии, а также градиенты средних величин во всей расчетной области,
- 3) коэффициенты асимметрии и эксцесса,
- 4) средние различных произведений пульсаций физических величин,
- 5) коэффициенты турбулентного переноса (турбулентная вязкость, турбулентная теплопроводность, турбулентное число Прандтля),
- 6) корреляционные функции (двухточечные моментные функции по терминологии [110]),
- 7) макро- и микромасштабы длины и времени для различных корреляционных функций,
- 8) спектры или, точнее, оценки спектральной плотности мощности пульсаций,
- 9) составляющие баланса турбулентной энергии,
- 10) проекции фазовых траекторий лагранжевых частиц.

Примеры применения программ статистической обработки приведены в работах [23, 254], а также в разд. 3.1. При практическом использовании программ статистической обработки важнейшее значение имеет организация архива данных и возможность оперативного видоизменения схемы обработки, т. е. работа в диалоговом режиме, который был рассмотрен в п. 2.2.2.

Глава 3

ТЕПЛОВАЯ КОНВЕКЦИЯ В ЗАМКНУТЫХ ПЛОСКИХ ОБЛАСТЯХ И СОСУДАХ

В данной главе рассматривается конвективный теплообмен в замкнутых областях и сосудах, являющихся простейшими моделями элементов конструкций, содержащих объемы, полностью или частично заполненные газом или жидкостью.

Задача о тепловой конвекции в вертикальном слое при заданных температурах на боковых поверхностях (см. разд. 3.1) — одна из первых классических задач конвективного теплообмена, которая решалась на основе уравнений Навье—Стокса. Вместе с тем вертикальный слой — один из типичных элементов конструкции. Физической особенностью конвекции в вертикальном слое при боковом подогреве является взаимодействие восходящего и нисходящего конвективных потоков, в результате которого устанавливается «собственная» вертикальная стратификация вдоль оси и формируется довольно сложная и существенно зависящая от числа Рэлея внутренняя структура в ядре течения и в итоге — местная и средняя теплопередача. Все эти особенности сложного течения, включая переход к турбулентному режиму конвекции, а также начало турбулентного режима, удаётся с достаточной для практических целей точностью рассчитать на основе численного решения нестационарных уравнений Навье—Стокса.

Задача о вызываемой градиентом силы поверхностного натяжения капиллярной конвекции в горизонтальном слое со свободной поверхностью (см. разд. 3.2) — одна из классических задач, играющих в теории негравитационной конвекции такую же роль, как и упомянутая выше задача о вертикальном слое в случае тепловой гравитационной конвекции. В обоих случаях механическое равновесие, т. е. равновесие при отсутствии конвекции, невозможно, поэтому движение имеет место при любом как угодно малом перепаде температур. При дальнейшем увеличении перепада температур, т. е. при больших значениях определяющих безразмерных критерииев — чисел Рэлея и Марангони, после потери устойчивости основного движения образуется многоячейковая структура. Эта структура определяет местный и средний теплообмен и весьма чувствительна к изменению параметров, в частности числа Прандтля и относительно удлинения слоя. Наиболее важными результатами, которые в настоящее время невозможно получить с помощью других методов, являются закономерности структуры движения и ха-

рактеристики теплообмена в существенно нелинейной области при больших значениях чисел Рэлея и Марангони и больших отношениях сторон слоя.

Задача о тепловой гравитационной конвекции в цилиндрическом сосуде, частично заполненном жидкостью, при заданном боковом потоке тепла (см. разд. 3.3) — одна из основных задач конвективного теплообмена при поддержании теплового режима в сосудах, предназначенных для длительного хранения жидкостей. Особенно важное значение имеет эта проблема в криогенной технике в связи с весьма жесткими требованиями к точности и надежности поддержания температурных режимов. Характеристики теплообмена и температурного расслоения, являющиеся основными для упомянутых приложений, изучаются здесь в процессе нестационарного прогрева жидкости. В связи с этим важно определение режимов конвекции и их длительности на диаграмме число Рэлея — число Фурье (безразмерное время). Математическое моделирование на основе нестационарных уравнений Навье—Стокса дает возможность установить некоторые общие закономерности конвекции в замкнутых областях, к числу которых принадлежат эффект максимума и тонкая структура температурного расслоения.

3.1. ТЕПЛОВАЯ ГРАВИТАЦИОННАЯ КОНВЕКЦИЯ В ВЕРТИКАЛЬНОМ СЛОЕ

Если боковые поверхности вертикального слоя, содержащего жидкость или газ, имеют различную температуру, то в слое возникает циркуляционное конвективное движение. При небольших перепадах температуры конвективный перенос тепла гораздо меньше, чем перенос путем теплопроводности, и число Нуссельта Nu , характеризующее отношение общего потока тепла к потоку тепла путем теплопроводности, равно 1. Для числа Рэлея, определенного по расстоянию между стенками, граница «слабого влияния» конвекции находится вблизи $Ra = 10^3$. При перепаде температур $T_2 - T_1 = 10^\circ\text{C}$ этому значению соответствует для воздуха расстояние около 1 см, а для воды — несколько миллиметров. Однако для многих практически важных случаев числа Рэлея гораздо больше ($10^5 - 10^{10}$) и перенос тепла осуществляется в основном путем конвекции ($Nu \gg 1$). Величина теплового потока, проходящего через слой, является основной характеристикой, которая изучается давно, начиная с экспериментов 1930 г. [243]. В этих экспериментах установлены эмпирические зависимости вида $Nu = aRa^b$, где a , b — константы, определяемые из опытов. Аналогичный вид имеют и аналитические формулы, полученные для бесконечного вертикального слоя (см., например, [43, 194]).

Начиная с 60-х годов [212] все большее внимание уделяется исследованию локальных характеристик конвекции в слое —

структуре течения и пограничных слоев, распределению местного потока тепла, стратификации. Этот интерес связан прежде всего с практическими требованиями к поддержанию теплового режима в элементах различных технических устройств. Выполнен ряд экспериментальных работ (см., например, [189, 213, 214, 234, 262, 277]), в которых изучался не только теплообмен для слоев различного удлинения и различных жидкостей (газов), но и структура течения с помощью интерферометра [212, 234] или стробоскопа с введением визуализирующих частиц. Для турбулентного режима конвекции, переход к которому возможен при числах Рэлея $Ra \geq 10^8$, в работах [34, 88, 98] проводилась статистическая обработка результатов изменения мгновенных значений температуры и скорости с определением средних величин, дисперсий и частот колебаний.

Техника экспериментальных работ в настоящее время позволяет определять не только перенос тепла через слой, но и локальную температуру и скорость, в частности, путем использования лазерных систем. Вместе с тем расширение диапазона определяющих параметров и детальные исследования локального распределения полей в слое все еще представляют сложную задачу. В эксперименте трудно изменять в широком диапазоне размеры слоя, перепад температуры, поддерживать заданные граничные условия (постоянство температуры или потока тепла). Имеются также трудности в определении структуры и локальных характеристик полей скорости и температуры во всем рабочем объеме и др. Подробные экспериментальные данные получены при относительно небольшом изменении числа Рэлея — на один–два порядка для ламинарного [212] и турбулентного [98, 238] режимов. В то же время эксперименты, в которых число Рэлея изменяется на три–пять порядков (за счет изменения вязкости теплоносителя или температуры и размеров установки) [234, 277], дают сильный разброс.

Получение детальных данных о характере тепломассообмена в слое, очевидно, невозможно без учета структуры и режимов течения. Анализ показывает, что границы структур и режимов (по числу Рэлея) связаны не только с геометрией области, но и со свойствами жидкости (газа). Методы численного моделирования позволяют в принципе проводить исследования для различной геометрии области в достаточно широком диапазоне изменения чисел Рэлея и Прандтля, однако методические и технические трудности до недавнего времени ограничивали диапазон применения этих методов в области больших чисел Рэлея [118, 215]. Основная часть работ по математическому моделированию связана с решением задач конвекции при малых и умеренных числах Рэлея. Результаты расчетов подтверждают, в частности, что при числах Рэлея, соответствующих режиму теплопроводности, реализуется простая одноячейковая структура течения; в переходном режиме при $H/L \gg 1$ возникает периодическая структура, исследованию которой по-

священо значительное число работ (см., например, [240]). В [199] показано, что при дальнейшем увеличении числа Рэлея сложная многоячейковая структура движения может вновь смениться одноячейковой циркуляцией.

В этом разделе приведены новые результаты численного моделирования конвекции в вертикальном слое при больших числах Рэлея, полученные с помощью описанных в данной книге методик и комплексов программ (см. разд. 1.1 и п. 6.1.1).

3.1.1. Математическая модель

Рассматривается естественная конвекция в плоском вертикальном слое конечной высоты H между двумя изотермическими поверхностями с температурой T_1 и T_2 , $T_2 > T_1$, расположеными одна от другой на расстоянии L . Основания слоя теплоизолированы. Сила тяжести направлена вдоль оси x (рис. 3.1).

Исходной для расчета является система нестационарных уравнений тепловой конвекции в переменных вихрь—функция тока—температура:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + U \frac{\partial \omega}{\partial x} + V \frac{\partial \omega}{\partial y} = \Delta \omega - \text{Gr} \frac{\partial \theta}{\partial y},$$

$$\Delta \psi = \omega, \quad U = \partial \psi / \partial x, \quad V = -\partial \psi / \partial y,$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + U \frac{\partial \theta}{\partial x} + V \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{1}{\text{Pr}} \Delta \theta.$$

Границные условия: для функции тока — условия прилипания на всем контуре; для безразмерной температуры $\theta = (T - T_1) / (T_2 - T_1)$

$$\begin{aligned} \theta &= 1, & y &= 0, & 0 \leq x \leq H/L, \\ \theta &= 0, & y &= 1, & 0 \leq x \leq H/L, \\ \partial \theta / \partial n &= 0, & x &= 0, H/L, & 0 < y < 1. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \theta &= 1, & y &= 0, & 0 \leq x \leq H/L, \\ \theta &= 0, & y &= 1, & 0 \leq x \leq H/L, \\ \partial \theta / \partial n &= 0, & x &= 0, H/L, & 0 < y < 1. \end{aligned}$$

Основные расчеты выполнены по неявной монотонной схеме (1.13), а часть — по явной схеме центральных разностей (1.15) с использованием векторного процессора. По вертикальной координате применялись равномерные сетки с числом узлов 129 или 200; по горизонтальной — равномерные и неравномерные сетки с числом узлов 37, 51 и 65. При обработке результатов использовалась графическая система «Динамика» (см. разд. 2.2, 6.5) и пакет статистической обработки (см. разд. 2.3, 6.4). При обработке результатов учитывалось, что

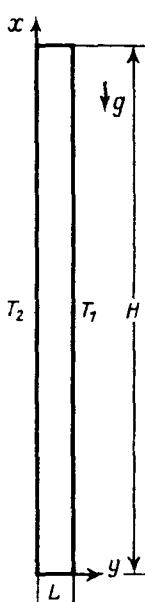


Рис. 3.1. Постановка задачи о тепловой конвекции в вертикальном слое

выход на стационарный или квазистационарный режим в вертикальных слоях с большим удлинением происходит существенно дольше, чем при $H \approx L$. Быстрее всего устанавливаются интегральные характеристики—максимальное значение функции тока и средний поток тепла через слой, а в последнюю очередь—структура потока, статистические характеристики (дисперсии, спектр и др.). Например, для выхода на квазистационарный режим при $Ra=10^6$, $Pr=0,7$ рассчитано около 3000 временных слоев с $\tau=2 \cdot 10^{-4}$. При этом установление средних величин с точностью не хуже 5% было уже после расчета 500 слоев. Для контроля выхода на квазистационарный режим и правильности выбора τ было просчитано дополнительно 3600 слоев при $\tau=5 \cdot 10^{-5}$ (сетка 200×65).

Результаты для различных Ra , H/L были получены, как правило, исходя из двух начальных распределений температуры и скорости, соответствующих решению при больших и меньших Ra , H/L . Для стационарного режима конвекции результаты расчетов не зависят от начальных данных. Если же параметры расчетов таковы, что стационарный режим отсутствует, то мгновенные значения полей скорости и температуры в один и тот же момент времени не совпадают. В этом случае необходима статистическая обработка численных реализаций (см. разд. 2.3).

3.1.2. Структура и режимы течения

Рассмотрим основные режимы конвективного течения и теплообмена в вертикальном слое с заданным постоянным перепадом температуры между стенками и теплоизолированными основаниями. В такой постановке границы между режимами определяются безразмерными параметрами Ra , Pr , H/L или их сочетаниями: $Ra_n = Ra(H/L)^3$, $Gr = Ra/Pr$ и т. п. Можно выделить режимы теплообмена (теплопроводность, конвекция). Для каждого режима существует своя область в диапазоне всех определяющих параметров. Попытки однозначного определения границ между режимами как функции только от одного параметра Ra , Ra_n или даже от двух параметров (Ra , H/L), (Ra_n , H/L) приводят к значительному разбросу и противоречиям между результатами разных авторов.

На рис. 3.2 в координатах Ra , H/L приведены параметры расчетов, выполненных для $Pr=0,7$, а также границы конвективной устойчивости, параметры экспериментов [212] и численных расчетов [240]. Вблизи $Ra=10^6$ проходит, как показано ниже, граница между стационарным и нестационарным режимами и граница между течениями с разной структурой, поэтому в этой области выполнены более подробные численные расчеты.

Структура течения является функцией всех трех основных параметров: Ra , Pr , H/L . На рис. 3.3 приведены изотермы и линии функций тока, показывающие влияние числа Ra на структуру этих полей для $Pr=0,7$ и $H/L=40$. При $Ra \approx 10^3$ пе-

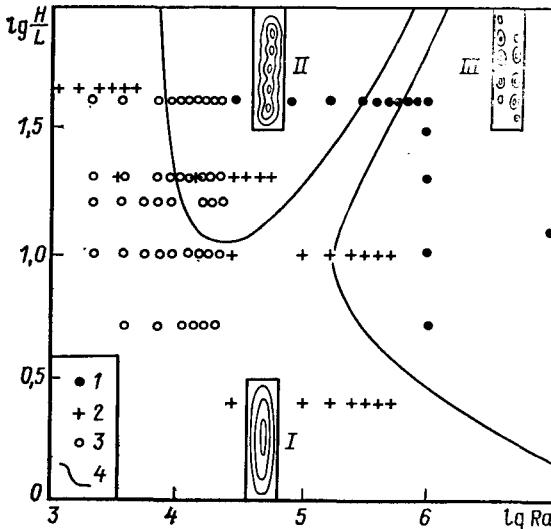


Рис. 3.2. Основные режимы конвективного движения в вертикальном слое при $\text{Pr} = 0,7$

Режимы:

- I — стационарный одноячейковый;
- II — стационарный многоячейковый;
- III — нестационарный многоячейковый (показаны характерные структуры),

- 1 — расчеты авторов,
- 2 — эксперименты [212],
- 3 — численные расчеты [240],
- 4 — границы конвективной устойчивости [254]

перенос тепла происходит путем теплопроводности и в основной части вертикального слоя реализуется течение с кубическим профилем скорости. Увеличение числа Рэлея (10^4 – 10^5) приводит к возникновению системы вытянутых по вертикали ячеек. Расстояние между ячейками (длина волны) зависит от определяющих параметров.

В работе [114] на основе метода Галеркина выполнено исследование устойчивости стационарных движений для случая $H=\infty$, $\text{Pr}=0$ (режим теплопроводности). Как видно из рис. 3.3, для $\text{Pr}=0,7$ распределение температуры отличается от теплопроводностного начиная с $\text{Ra} \approx 10^4$. Увеличение Ra ведет к формированию устойчивой температурной стратификации, которая оказывает стабилизирующее действие на течение. Со взаимодействием системы ячеек при $\text{Ra} \approx 10^4 \div 2 \cdot 10^5$ могут быть связаны колебания интенсивности циркуляции в отдельных ячейках, однако вклад дополнительной циркуляции в ячейках в перенос тепла поперек слоя при данных параметрах мал.

При $\text{Ra} \approx 2 \cdot 10^5$ взаимодействие встречных потоков ослабевает: между ними образуется застойная зона, что ведет к исчезновению системы вихрей [254]. Влияние устойчивой стратификации усиливается, особенно вблизи торцов, где направление движения изменяется, а интенсивность падает. Это влияние проявляется в том, что вблизи торцов образуются зоны повышенной устойчивости и основная циркуляция оттесняется от этих областей. При $\text{Ra} \geq 3 \cdot 10^5$ возникает качественно новая форма движения: восходящий вдоль нагретой стенки поток разделяется приблизительно на высоте $0,75H$ на две части, одна из которых продолжает восходящее движение, а другая переходит во встречный поток вдоль холодной стенки, который ве-

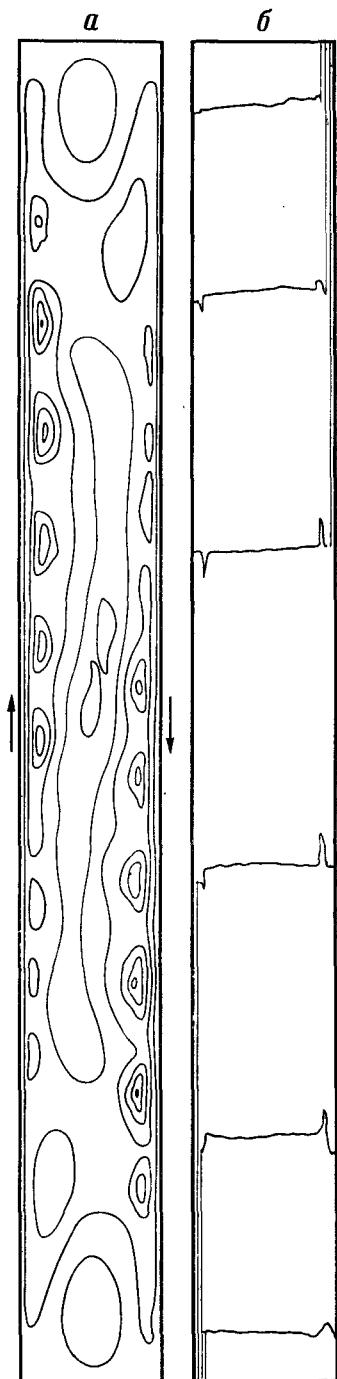
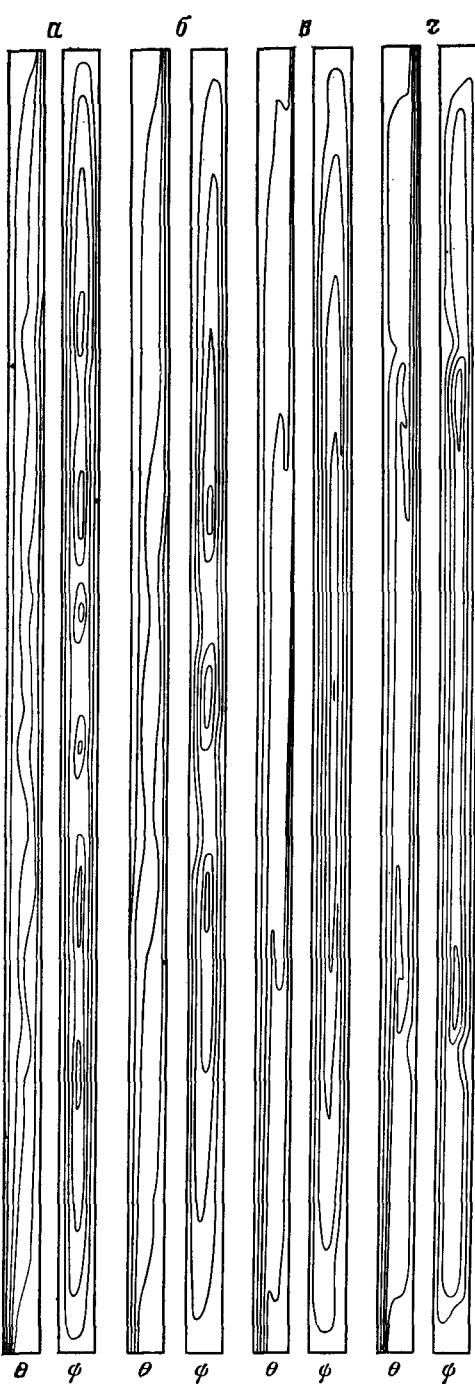
дет себя аналогично, расщепляясь на высоте $H/4$. Такое движение отражается на распределении температуры и потоков тепла в слое и будет детально рассмотрено ниже.

При $Ra \approx 7 \cdot 10^5$ появляются колебания температуры и скорости в пристеночной области (на нагретой стенке – вблизи верхнего торца, на холодной – вблизи нижнего). Для $Ra=10^6$ (см. рис. 3.3) эти колебания практически не сказываются на структуре основного потока, средних локальных и интегральных характеристиках.

Дальнейшее увеличение Ra до $(2 \div 4) \cdot 10^6 \div 10^8$ и соответствующее повышение интенсивности движения приводят к появлению нерегулярных вихревых структур с масштабом порядка L . Это сопровождается резким возрастанием амплитуды колебаний интегральных и локальных характеристик тепломассообмена, что характерно для переходного к турбулентности режима.

Ячеистая структура движения, связанная со взаимодействием встречных потоков при умеренных числах Рэлея в вертикальном слое, исследовалась как экспериментальными, так и теоретическими методами. При $Pr \approx 1$, что соответствует одинаковым толщинам теплового и динамического пограничных слоев, границы существования такой структуры соответствуют переходному режиму (от теплопроводности к режиму пограничного слоя), т. е. $Ra \approx 10^4 \div 10^5$. Однако имеются отдельные экспериментальные работы [214, 238, 262], из которых можно сделать вывод о наличии при числах Рэлея $Ra \geq 10^6$ другого типа вихревого движения – системы мелких по сравнению с шириной слоя вихрей, возникающих на некоторой высоте и движущихся с жидкостью вблизи пограничного слоя вдоль каждой стенки. Теоретически такое вихревое движение было получено, по-видимому, впервые в работах [60, 61] для условий, соответствующих опытам [238]. Типичный вид такой структуры показан на рис. 3.4 ($Ra=1,5 \cdot 10^6$, $H/L=20$, $Pr=15$). Для стационарных режимов линии функции тока совпадают с траекториями движения жидкости и позволяют получить достаточно полную информацию о структуре течения (нестационарные (квазистационарные) режимы рассмотрены в разд. 3.5).

Анализ структуры течения по изолиниям функции тока (рис. 3.5) нуждается в некоторых дополнительных комментариях. Рассмотрим прежде всего профиль функции тока в горизонтальном сечении слоя на высоте $H/2$. При фиксированном числе Рэлея $Ra=10^6$ для $H/L=5$ существуют три экстремальных значения ψ и соответственно $U=0$. Направление потока с переходом через каждый экстремум меняется на противоположное. На рис. 3.5 показаны линии тока вблизи центральной части слоя с обозначенными направлениями движения. Функция тока при этом знакопостоянна во всем слое. Эта особенность структуры – наличие слабого движения с направлением, противоположным основному потоку, проявляется для $Ra=10^6$, $Pr=0,7$ при отношениях сторон $H/L \leq 20$.



На рис. 3.6 приведены профили функции тока по вертикальной оси слоя для различных H/L . Обращает на себя внимание рост числа локальных экстремумов при увеличении H/L . Однако амплитуда этих экстремумов, как правило, невелика, и на изолиниях ψ они могут быть не видны. Другая характерная особенность вертикального распределения ψ — появление при $H/L \geq 20$ внутренней зоны циркуляции с довольно резкой границей, отделяющей приторцовые области от центральной.

Удлинение слоя влияет на стратификацию, распределение скорости, стационарность процесса. При $H/L=5$ ($Ra=10^6$, $Pr=0,7$) течение практически стационарно, максимальные локальные изменения температуры и скорости не превышают 1 %. Температурные и динамические пограничные слои разделены областью с линейной стратификацией, в которой изотермы почти горизонтальны. В увеличенном виде изотермы в центральной по высоте части слоя для $H/L=5$ представлены на рис. 3.7. Увеличение высоты слоя приводит к росту скорости подъемно-опускного движения и смыканию пограничных слоев. При $H/L=10$ и 20 в пограничном слое наблюдаются волнобразные возмущения. При $H/L=20$ и 30 отчетливо прослеживается уже описанный эффект замыкания потока с образованием зоны повышенной циркуляции. Дальнейшее увеличение H/L до 40 существенно не меняет структуру течения. Размер области «внутренней циркуляции» по отношению к высоте слоя уменьшается.

3.1.3. Зависимость суммарного потока тепла и других интегральных характеристик от чисел Рэлея, Прандтля и отношения слоя

В данном подразделе приведены сведения о влиянии каждого из определяющих параметров на поток тепла Nu и интенсивность движения (максимальные функции тока ψ_{max} и скорость вертикального движения U_{max}) для $Ra=10^5 \div 10^6$, $H/L=5 \div 40$, $Pr=0,7 \div 15$. Эти интегральные характеристики зачастую являются единственными или основными результатами экспериментальных и теоретических работ; представляет значительный интерес определение их связи с изменением структуры, режима конвекции, местного потока тепла и др.

Зависимость $Nu(Ra)$ исследовалась практически во всех работах как основная характеристика конвекции. Типичными

Рис. 3.3. Изотермы θ и линии тока ψ для разных значений Ra
Число Ra равно: $a = 10^4$; $b = 8 \cdot 10^4$; $c = 3 \cdot 10^5$; $d = 10^6$

Рис. 3.4. Характерный для больших чисел Рэлея ($Ra \geq 10^8$) вид структуры течения с ячейками, возникающими и движущимися вдоль вертикальных стенок
 a — линии тока; b — изотермы; $Ra = 1,5 \cdot 10^9$, $H/L = 20$, $Pr = 15$

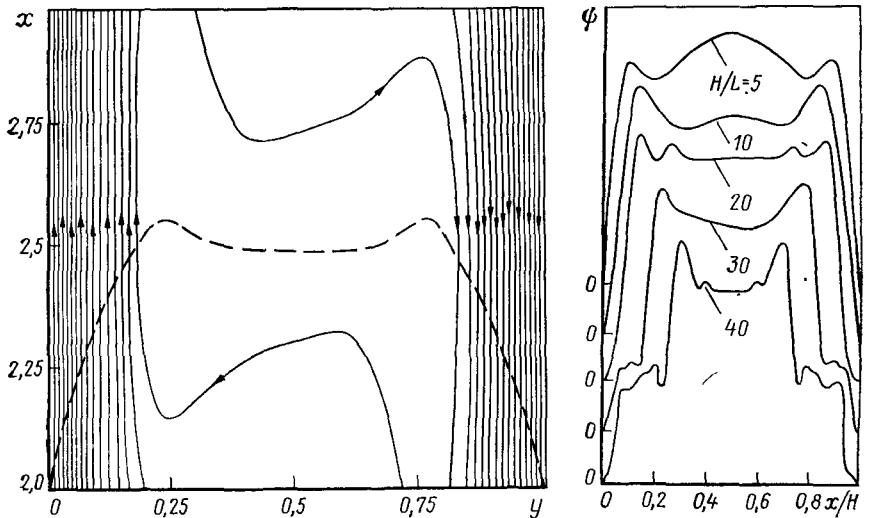


Рис. 3.5. Изолинии функции тока в центральной по высоте части слоя ($\text{Ra}=10^6$, $\text{Pr}=0,7$, $H/L=5$) и горизонтальный профиль функции тока на высоте $x=H/2$ (штриховая линия)

Локальные экстремумы $\Phi(x)$ разделяют области с различным направлением вертикальной составляющей скорости

Рис. 3.6. Распределение функции тока вдоль вертикальной оси слоя при различных удлинениях H/L ($\text{Ra}=10^6$, $\text{Pr}=0,7$)

Увеличение H/L ведет к относительному снижению интенсивности течения вблизи торцов

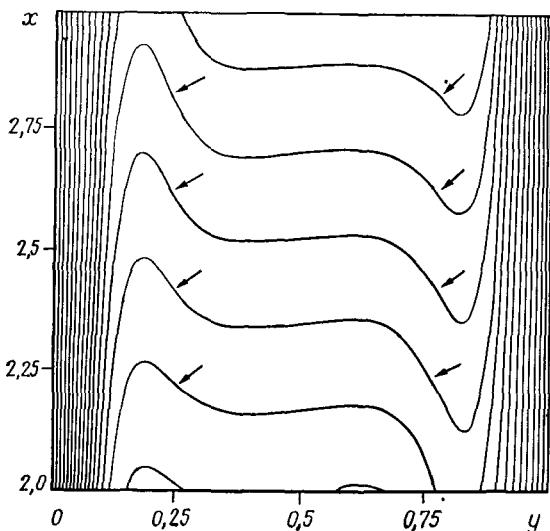


Рис. 3.7. Изотермы в центральной по высоте части слоя ($\text{Ra}=10^6$, $\text{Pr}=0,7$, $H/L=5$)

Влияние устойчивой температурной стратификации в ядре на основное конвективное течение приводит к образованию «обратных» градиентов температуры (указано стрелками)

Таблица 3.1. Аппроксимация зависимости интегрального потока тепла
 $Nu = c Ra^a (H/L)^b$ для воздуха по данным разных авторов

Ra	H/L	c	a	$-b$
$1,5 \cdot 10^4 - 1,5 \cdot 10^5$	3—42	0,20	0,25	0,11
$6 \cdot 10^4 - 1,5 \cdot 10^5$	10	0,13	0,3	0,1
$10^3 - 5 \cdot 10^6$	5—78	0,23	0,269	0,131
$4 \cdot 10^3 - 1,4 \cdot 10^5$	2,5—20	0,17	0,315	0,265
$1,7 \cdot 10^4 - 1,4 \cdot 10^6$	5—20	0,216	0,263	0,210
$< 3000 H/L$	> 5	0,286	0,258	0,238
$< 2 \cdot 10^5$	4—32	0,29	0,25	0,25

Таблица 3.2. Зависимость характеристик тепломассообмена $F = c(H/L)^{a \pm e}$ от H/L ($Ra=10^6$, $Pr=0,71$)

F	H/L	a	e	c	F	H/L	a	e	c
Nu	5—40	-0,25	0,01	10	Ψ_{\max}	5—15	1,10	0,05	14
Nu_H	5—40	0,75	0,02	10		15—40	0,72	0,05	40
U_{\max}	5—40	0,58	0,03	275					

для большинства работ являются аппроксимации этой зависимости в форме $Nu=cRa^a$ или

$$Nu=cRa^a(H/L)^b. \quad (3.1)$$

В табл. 3.1 приведены значения a , b , c , предлагаемые различными авторами для воздуха. Изменение геометрических размеров и перепада температур между стенками ведет к изменению числа Нуссельта; эта зависимость различна при разных числах Рэлея, что, по-видимому, связано со структурными особенностями течения.

Зависимость основных интегральных характеристик от Ra приведена на рис. 3.8, а. В диапазоне чисел Рэлея $10^5 - 10^6$, несмотря на значительные изменения в структуре движения, наблюдается логарифмическая зависимость анализируемых параметров решения от Ra . (На этом же рисунке приведены результаты для вертикального градиента температуры в центре слоя t ($x=H/2$, $y=L/2$), обсуждаемые в следующем подразделе.)

На рис. 3.8, б приведены значения основных интегральных характеристик: Nu , Nu_H , Ψ_{\max} , U_{\max} , t в зависимости от удлинения слоя. При использовании логарифмической шкалы и аргумента значения Nu , Nu_H , U_{\max} хорошо ложатся на аппроксимирующие прямые. Более сложный характер зависимостей $\Psi_{\max}(H/L)$ и $t(H/L)$, по-видимому, связан с формированием внутренней циркуляции при $H/L \gtrsim 15 - 20$. В табл. 3.2 приведе-

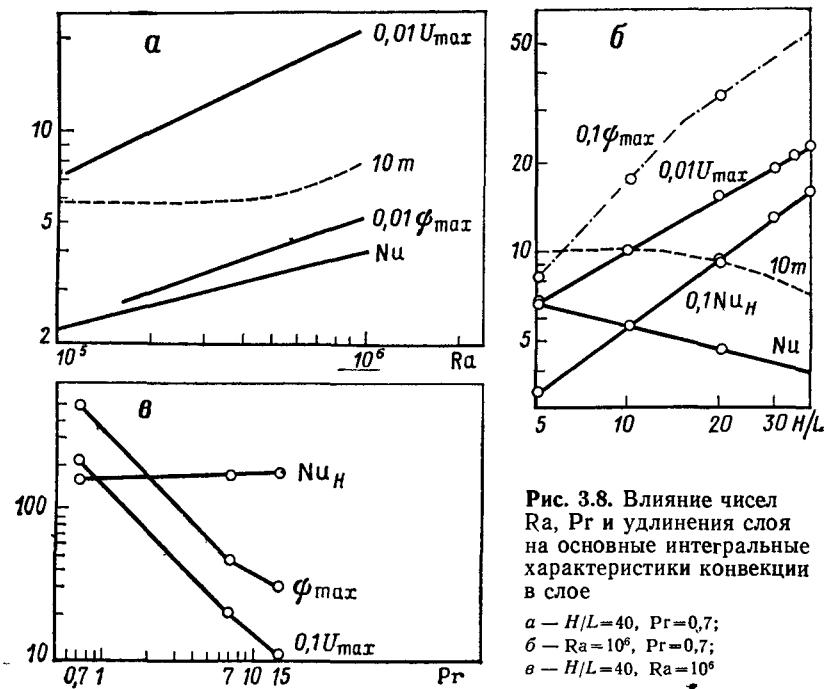


Рис. 3.8. Влияние чисел
Ra, Pr и удлинения слоя
на основные интегральные
характеристики конвекции
в слое

а — $H/L=40$, $Pr=0,7$;
б — $Ra=10^6$, $Pr=0,7$;
в — $H/L=40$, $Ra=10^6$

ны значения показателя степени a для этих характеристик, соответствующие рис. 3.8, б.

На рис. 3.8, в приведены значения Nu_H , ϕ_{max} , U_{max} для $Pr=0,7$; 7 и 15. Зависимости от числа Pr могут быть аппроксимированы степенными функциями в виде

$$Nu_H = cPr^{0,025}, \quad U_{max} = cPr^{-1}.$$

По экспериментальным данным значение показателя степени в зависимости $Nu(Pr)$ лежит в диапазоне 0,012–0,027.

Приведенные выше результаты показывают, что при достаточно больших числах Рэлея изменение интегральных характеристик, и прежде всего числа Nu , слабо зависит от структуры движения. Тем не менее разброс значений Nu , полученных в различных экспериментах и расчетах (см., например, табл. 3.1), довольно велик. Как показано в некоторых работах, этот разброс значительно уменьшается, если данные аппроксимировать в виде

$$Nu_H = cRa^\gamma. \quad (3.2)$$

Нетрудно показать, что (3.2) эквивалентно следующему выражению:

$$Nu = cRa^\gamma(H/L)^{3\gamma-1}, \quad (3.3)$$

т. е. вместо приведенных в табл. 3.1 показателей степени a и b можно использовать один параметр. В частности, при $\gamma=1/3$

имеем $Nu = cRa^{1/3}$. Последняя формула не содержит отношения сторон и соответствует эмпирическому закону теплообмена в турбулентном режиме.

3.1.4. Локальные характеристики конвекции

Ниже результаты расчетов представлены в виде зависимости местного числа Нуссельта $Nu_x = q(x)x/\Delta T_x$ от местного числа Рэлея $Ra_x = g\beta\Delta T_x x^3/(va)$, где x – координата вдоль нагретой стенки, ΔT_x – перепад температуры между нагретой стенкой и центральной частью слоя на высоте x . В [212] получена зависимость для ламинарного режима

$$Nu_x = 0,231Gr_x^{0,3}, \quad (3.4)$$

а в работе [98] – для турбулентного режима

$$Nu_x = 0,104Ra_x^{1/8}. \quad (3.5)$$

На рис. 3.9, *a* представлены результаты для $Ra_x \leq 10^7$, полученные при различных H/L , Ra , Pr . Как видим, корреляция с зависимостью (3.4) очень хорошая. При $Ra_x \geq 10^6$ намечается систематическое отклонение расчетных результатов от этой зависимости, однако, если рассмотреть весь диапазон $Ra_x \leq 10^{11}$ (рис. 3.9, *б*), можно сделать вывод о том, что при $Ra_x = 10^6 \div 10^8$ происходит переход к соотношению (3.5). Приведенные результаты расчетов соответствуют ламинарному режиму конвекции.

Возникает вопрос, чем определяется зависимость $Nu(H/L)$: локальными эффектами (вблизи торцов) или другими причинами. На рис. 3.10 даны распределения потока тепла вдоль нагретой стенки при двух значениях удлинения H/L (10 и 30). Видно, что поток тепла изменяется пропорционально вдоль всего слоя. Колебания теплового потока при $x \approx H$ связаны с нестационарным движением вихрей, рассматриваемым ниже.

Из данных экспериментальных и теоретических работ не следует однозначная картина зависимости вертикального градиента температуры в центре полости $m = (\partial T_{max}/\partial x)H$ от определяющих параметров. В режиме теплопроводности вертикальный градиент $m=0$.

С развитием конвекции значение m возрастает. По данным работы [212], при $Ra \approx 2 \cdot 10^4 \div 3 \cdot 10^5$ (воздух, $H/L=10$) $m \approx 0,6$. В работе [213] для $Ra > 10^5$ приведены значения $m=0,5$ и $0,55$ ($Pr=10^3$). В турбулентном режиме, по экспериментальным данным [238], m уменьшается до 0,33. Таким образом, разброс данных по m весьма велик и приведенные в литературе значения являются усредненными, полученными при разных параметрах, и верны лишь для вполне определенной высоты слоя.

Из результатов, приведенных выше (на рис. 3.8, *а*, *б*), следует, что градиент температуры зависит и от удлинения слоя, и от структуры течения, и от числа Рэлея. В частности, монотонное изменение одного из определяющих параметров (напри-

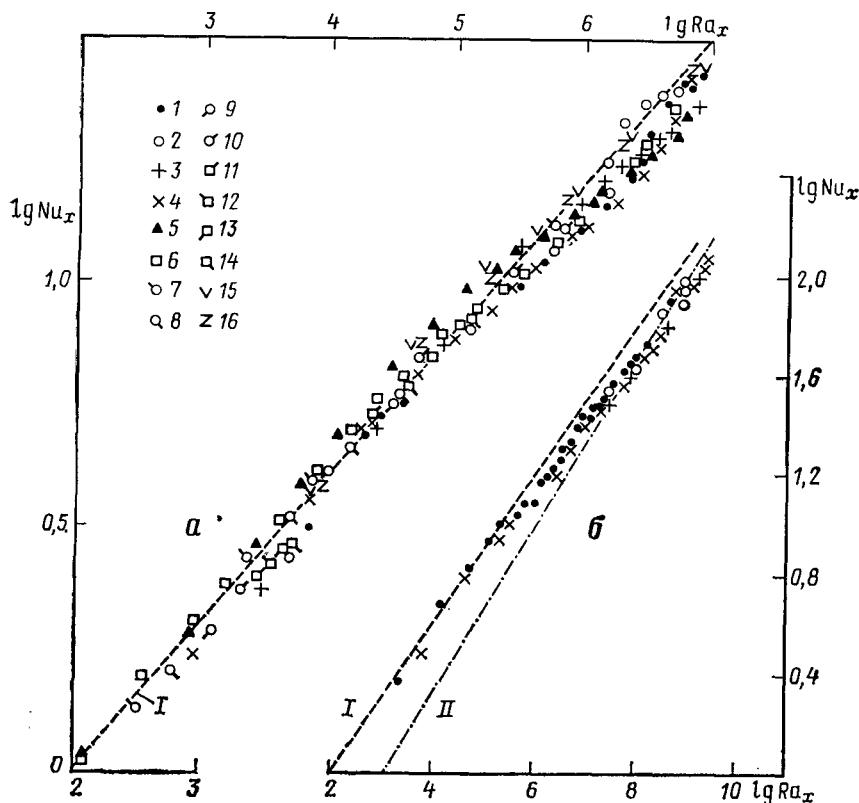


Рис. 3.9. Зависимость местного числа Нуссельта от местного числа Рэлея на нагретой стенке

$$I - \text{Nu}_x = 0,231\text{Gr}_x^{0.3}; II - \text{Nu}_x = 0,104\text{Ra}_x^{1/3}.$$

I — 6 — $\text{Ra}=10^6$, $\text{Pr}=0,7$ (H/L : 1 — 40, 2 — 35, 3 — 30, 4 — 20, 5 — 10, 6 — 5); 7 — 14 — $H/L=40$, $\text{Pr}=0,7$ (Ra : 7 — $4 \cdot 10^4$, 8 — $8 \cdot 10^4$, 9 — $1,6 \cdot 10^5$, 10 — $3 \cdot 10^5$, 11 — $4 \cdot 10^5$, 12 — $5 \cdot 10^5$, 13 — $6 \cdot 10^5$, 14 — $7 \cdot 10^5$); 15, 16 — $H/L=40$, $\text{Ra}=10^6$ (Pr : 15 — 7,0, 16 — 15,0)

мер, H/L) может приводить к немонотонному изменению стратификации. Такая зависимость от числа Рэлея (эффект максимума температурного расслоения) была обнаружена в 60-х годах и довольно подробно исследована в связи с важностью этого эффекта в ряде приложений [134, 137].

На рис. 3.11 приведено полученное в расчетах распределение температуры вдоль вертикальной линии $y=0,5$. В центральной части слоя при $\text{Ra}=10^6$, т. е. в режиме пограничного слоя, удлинение слабо влияет на стратификацию. Температура θ на теплоизолированных торцах заметно зависит от удлинения и составляет, в частности, на нижнем торце при $H/L=5$ и $H/L=30$ соответственно 0,09 и 0,03. С ростом H/L уменьшается относительный размер центральной зоны с постоянным градиен-

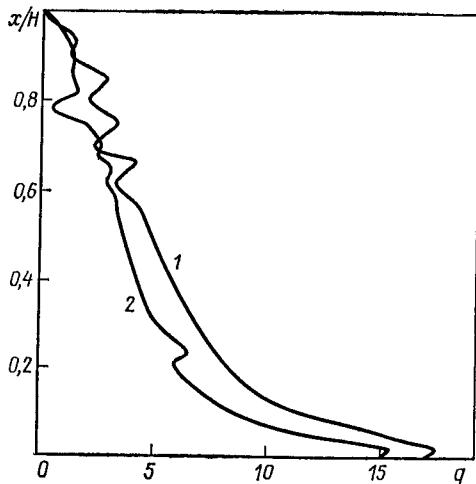


Рис. 3.10. Распределение потока тепла вдоль нагретой стенки

1 — $H/L=10$, 2 — 30. Изменение отношения сторон приблизительно одинаково влияет на поток у основания слоя и в центральной части

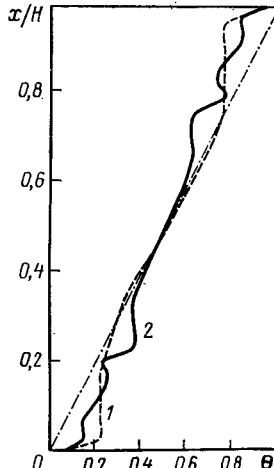


Рис. 3.11. Распределение температуры вдоль оси слоя для разных H/L и $Ra = 10^6$, $Pr = 0,7$

1 — $H/L = 10$, 2 — 30; линия $\theta = x/H$ соответствует $m = 1$

том температуры, существенно изменяется распределение температуры вблизи торцов.

При числах Рэлея $10^3 - 10^5$ распределение температуры по вертикали сильно зависит от структуры течения, поскольку эффекты температурного расслоения играют второстепенную роль из-за близости пограничных слоев (профиль скорости поперек слоя близок к кубическому, а температура между изотермическими стенками изменяется почти линейно по y). При стационарной ячеистой структуре течения можно наблюдать периодическое изменение температуры по вертикали.

На приведенных выше рисунках видно существование обратных градиентов температуры в поперечном сечении слоя, т. е. локальных областей с направлением потока тепла от оси слоя в сторону нагретой стенки. Образование таких областей связано со взаимодействием теплового пограничного слоя с потоком, имеющим (в связи с предысторией его движения до рассматриваемого уровня) неоднородное распределение температуры и скорости по горизонтали.

Рассмотрим для определенности подъемное движение вдоль нагретой стенки. На внешней части динамического пограничного слоя градиент температуры уменьшается до нуля, но подъемное движение выносит из нижней части слоя более холодную жидкость (газ), что и вызывает появление отрицательного гра-

диента температуры. Поток тепла в направлении горячей стеки компенсируется вертикальным конвективным переносом. Различие в скоростях конвективного и диффузационного переноса тепла приводит к появлению зон с опускным движением.

При рассмотренном механизме теплообмена эти зоны могут существовать только в области обратных градиентов температуры. Увеличение расстояния между встречными потоками, очевидно, не вносит существенных изменений.

3.1.5. Нестационарные ламинарный и турбулентный режимы

Возникновению ячеистого движения предшествуют (при изменении числа Рэлея и фиксированном $H/L=40$) колебания температуры и скорости в пограничном слое, амплитуда которых составляет при $Ra=5 \cdot 10^5$ примерно 1% и возрастает при $Ra=-7 \cdot 10^5$ до 10% от среднего значения. На рис. 3.12 приведены вертикальные профили температуры на различных расстояниях от нагретой стенки. При $Ra=(4 \div 5) \cdot 10^5$ колебаний температуры практически нет. Колебания профиля температуры заметны уже при $Ra=6 \cdot 10^5$ и отчетливо выражены при $Ra=7 \cdot 10^5$. Они локализованы в центральной по высоте однородной части слоя, которая соответствует максимальным значениям скорости. В отличие от профилей температуры при ячеистой структуре стационарного типа максимальные амплитуды колебаний связаны с областью пограничного слоя (см. [45, 59, 179]). Кроме того, эти возмущения движутся вместе с потоком. При уменьшении отношения сторон до 5 и фиксированном $Ra=10^6$ колебания температуры исчезают.

Ниже приведены некоторые результаты расчетов, выполненных для $Ra=3,75 \cdot 10^8$, $Pr=15$, $H/L=11,2$. Этим безразмерным параметрам, согласно [238], соответствуют такие размерные параметры: $L=60$ мм, $H=680$ мм, $\Delta T=32^\circ\text{C}$, $T_2=48^\circ\text{C}$, $T_1=16^\circ\text{C}$.

Изотермичность поверхностей в этих опытах поддерживалась с точностью 1—1,5° С. При этом число Рэлея Ra_n , отнесенное к высоте слоя, равно $5,25 \cdot 10^{11}$, т. е. режим течения в пограничном слое на большей части боковой поверхности должен быть турбулентным.

На рис. 3.4 (см. также рис. 3.3) дана мгновенная картина линий тока в вертикальном слое в один из моментов времени. Мгновенное поле течения состоит из трех характерных зон: 1) тонких пристеночных пограничных слоев; 2) системы сравнительно мелких вихрей, распределенных периодически на внешних границах пограничных слоев у нагретой и холодной стенок; 3) системы крупных вихрей в конвективном ядре. Эта картина согласуется с полученными в экспериментах мгновенными картинами течения (визуализация с помощью алюминиевой пудры, пузырьков водорода, частиц полистирена).

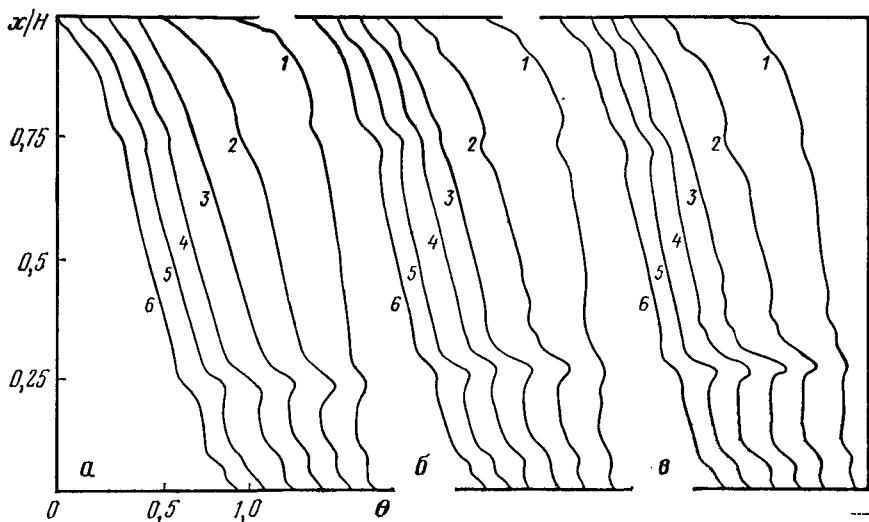


Рис. 3.12. Вертикальные профили температуры для $H/L=40$, $\text{Pr}=0,7$

$a - \text{Ra} = 4 \cdot 10^5$; $b - \text{Ra} = 6 \cdot 10^5$; $v - \text{Ra} = 7 \cdot 10^5$. Расстояние от холодной стенки: 1 — 0,078, 2 — 0,156, 3 — 0,234, 4 — 0,313, 5 — 0,391, 6 — 0,469

Характерные частоты, амплитуда и их пространственное изменение согласуются с данными [97, 98, 238]. Максимальная амплитуда пульсаций продольной компоненты скорости $U(t)$ составляет около 15—20%, температуры — около 3—4%, характерный период — около 2 с. Разностное решение довольно хорошо передает основные качественные особенности изменения во времени полей скорости и температуры. Пульсации скорости наиболее интенсивны и менее регулярны (модулированы) вблизи максимума средней скорости и на внешней части пограничного слоя. В вязком подслое у стенки пульсации довольно регулярны, практически не модулированы и менее интенсивны (рис. 3.13).

Наибольший период и наименьшую амплитуду имеют пульсации в конвективном ядре, что связано с большим масштабом вихрей в этой зоне. Максимальная интенсивность движения (около 30 мм/с, что соответствует числу Рейнольдса $\text{Re} = U_{\max}L/v \approx 10^3$), период основной частоты пульсаций в зоне максимума вертикальной скорости, равный 1—2 с, максимальное значение уровня пульсаций (10—15% от среднего значения скорости и 4—5% от среднего значения температуры) указывают на низкочастотный характер турбулентной конвекции в данных условиях, что согласуется с результатами измерений. Однако в отличие от наблюдаемых разностные реализации скоростей и температур в пограничном слое более регулярны в связи с тем, что мелкомасштабная структура конвекции не разрешается сеткой. Но в конвективном ядре на фоне колебаний основного крупномасштабного потока хорошо видны и пульсации, связанные с

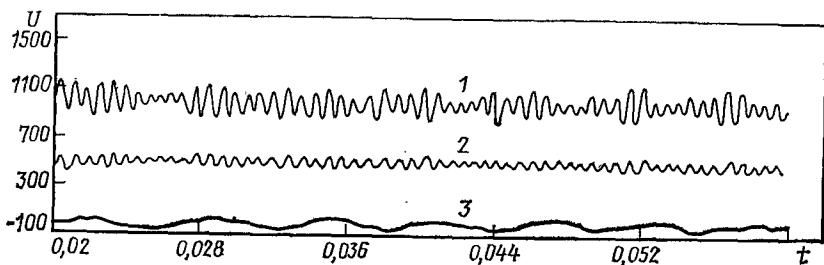


Рис. 3.13. Пульсации горизонтальной составляющей скорости в пограничном слое

y равно:
1 — 0,02,
2 — 0,005,
3 — 0,5

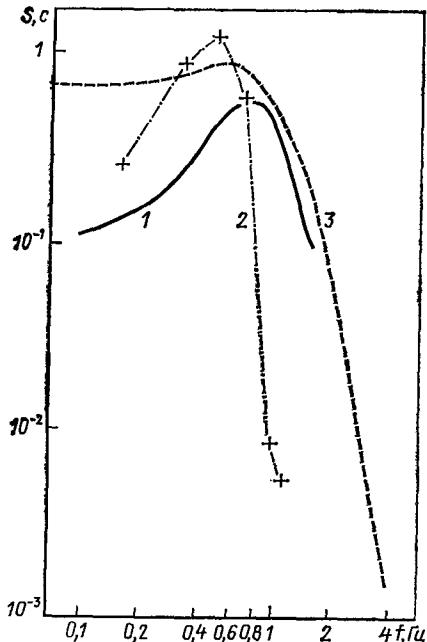


Рис. 3.14. Спектральная плотность пульсаций температуры в вязком подслое

1 — расчет методом максимальной энтропии с выделением начала участка обработки по установлению среднего,
2 — расчет методом БПФ [63],
3 — данные эксперимента [88]

движением меньших масштабов, что характерно для турбулентных течений.

Осреднение на участках обработки при различных периодах выявило, что средние значения скорости, температуры и вторых моментов устанавливаются уже после нескольких периодов колебаний. Осредненные разностные решения правильно передают величину и характер распределения среднеквадратичных пульсаций скорости и температуры, толщины теплового и динамического пограничных слоев и основные закономерности турбулентной конвекции в ядре (наличие широкого изотермического участка по горизонтали в различных сечениях по высоте, весьма малое значение средней скорости и др.).

Весьма существенной характеристикой конвективного режима является спектральная плотность пульсаций температуры; результаты сопоставления расчетов этой характеристики с данными эксперимента практически отсутствуют. Начиная с 1976 г.

авторами предпринималось несколько попыток расчета спектральных характеристик по различным численным реализациям, полученным по усовершенствованным методикам (подробнее см. [23, 63]). Существенные усовершенствования вносились и в метод расчета спектральной характеристики; важно также, что достигнуто определенное соответствие метода обработки экспериментальных данных и данных численного моделирования.

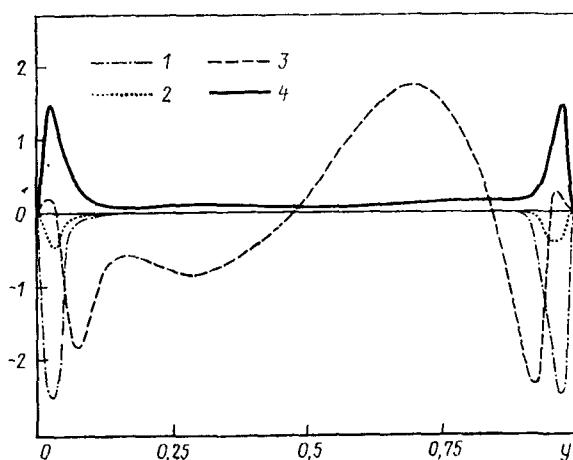
На рис. 3.14 приведены экспериментальные и расчетные [254] данные. Здесь в отличие от работы [63], где выполнялось аналогичное сопоставление, все результаты соответствуют вертикальному слою. Данные численного моделирования (кривая 1) хорошо согласуются с данными эксперимента в области средних частот $f \approx 1-2$ Гц и заметно расходятся в области низких частот $f \approx 0,1$ Гц. Последнее, возможно, связано с наличием низкочастотных температурных возмущений в эксперименте.

На рис. 3.15 показано полученное в расчетах распределение напряжений турбулентного трения $\overline{U'V'}$. В основной части пограничного слоя вклад собственно турбулентности мал. Во внешней части пограничного слоя значение v_t/v увеличивается до 1—3, в конвективном ядре достигает значений 20—30.

Полученные оценки и сопоставления с опытными данными позволяют сделать вывод о том, что в рассматриваемом диапазоне параметров турбулентность имеет специфические особенности: в ней преобладают двумерные эффекты; развитие пульсаций скорости и температуры вдоль нагреваемой стенки зависит от стратификации, в свою очередь связанной с удлинением слоя; в поперечном направлении наблюдается значительная неравномерность распределения турбулентных коэффициентов обмена. Учет полученных результатов необходим как при анализе имеющихся экспериментальных данных, так и при построении теоретических моделей турбулентного режима конвекции.

Рис. 3.15. Распределение некоторых статистических характеристик турбулентного режима конвекции в поперечном сечении слоя

$x = H/2$,
 $Ra = 3,75 \cdot 10^9$,
 $Pr = 15$,
 $H/L = 11,2$
 $1 - \overline{U'\theta'}$,
 $2 - \overline{V'\theta'}$,
 $3 - 0,002\overline{U'V'}$,
 $4 - 0,025\sqrt{\overline{\theta'^2}}$



3.2. КАПИЛЛЯРНАЯ КОНВЕКЦИЯ В ПЛОСКИХ ОБЛАСТЯХ

Конвективные течения, вызываемые градиентом сил поверхности натяжения, возникают при наличии на поверхностях раздела жидкость—газ, жидкость—жидкость неоднородного распределения температуры и/или концентрации примеси. В условиях нормальной силы тяжести эти течения, как правило, слабо проявляются на фоне более интенсивной гравитационной конвекции, однако в установках получения кристаллов, в реакторах пленочного типа, применяемых в химической технологии, а также в сосудах для хранения жидкостей и многих других технических и технологических аппаратах конвекция этого типа может оказывать заметное влияние на процессы тепло- и массообмена и вследствие этого на качество продукции.

В последнее время интенсивно развивается новое научное направление — гидромеханика и тепломассообмен в невесомости [46, 47, 131, 169], основной целью которого является изучение и практическое использование особенностей конвективного переноса в космосе. При орбитальном полете космического аппарата микроускорения имеют порядок $(10^{-3} \div 10^{-6})g_0$, где g_0 — ускорение свободного падения на поверхности Земли. В этих условиях интенсивность гравитационной конвекции значительно снижается и капиллярная конвекция становится одним из основных механизмов, приводящих к перемешиванию жидкости.

Исследование капиллярной конвекции — достаточно сложная экспериментальная задача, что связано с необходимостью проведения наземных экспериментов в небольших объемах жидкости [209, 257], причем для получения достоверных количественных и качественных данных требуется тщательный контроль условий теплообмена и распределения температуры вдоль свободной поверхности.

Термокапиллярную конвекцию можно изучать в достаточно больших объемах лишь при значительном понижении уровня силы тяжести, например в башнях сбрасывания [121], при полете самолета по баллистической траектории, а также на борту космических аппаратов. Но в первом и втором случаях кратковременность, а в последнем случае значительная стоимость ограничивают возможности эксперимента. Тем не менее в последнее время были проведены эксперименты на приборе «Пион» [1], а также запланированы эксперименты на специальной установке для исследования физики жидкости в условиях невесомости [7].

Исследование нестационарных термокапиллярных течений в условиях нормальной силы тяжести проведено в [87]. Такой подход оказался возможным благодаря значительному различию характерных времен развития гравитационной тепловой и термокапиллярной конвекций [136].

В аналитических подходах главенствующее место занимает исследование устойчивости термокапиллярных течений как при

подогреве снизу [259], так и в случае заданного градиента температуры вдоль свободной поверхности в бесконечных слоях жидкости [265]. Для термокапиллярной конвекции свойственна ранняя потеря устойчивости: критическое число Марангони $M_p \approx \approx 10^2$ лежит значительно ниже диапазона, характерного для прикладных задач ($M_p = 10^4 \div 10^6$).

В ряде работ были получены аналитические решения, описывающие течение и перенос тепла в ограниченных слоях жидкости [87, 263]. При этом, как правило, предполагается, что число Марангони пропорционально целой степени отношения сторон. Хотя такие решения и проливают свет на особенности термокапиллярной конвекции, диапазон их применимости лежит значительно ниже требований практики.

В работе [278] проведено прямое аналитическое исследование термокапиллярной конвекции в квадратной области при заданном перепаде температуры вдоль свободной поверхности, причем авторы отмечают, что трудности прямого численного моделирования задач термокапиллярной конвекции не превышают сложности аналитического подхода.

Численное моделирование задач термокапиллярной конвекции при производстве монокристаллов методом зонной плавки выполнено, например, в работах [103, 206, 210], где, как и в ряде других, авторы были вынуждены снизить основные режимные параметры, что обусловлено значительными трудностями при учете таких особенностей процесса, как движение фронтов плавления и кристаллизации, их искривления, изменения формы свободной поверхности и т. д.

Сложности численного и аналитического моделирования термокапиллярных течений в реальных процессах делают актуальным изучение капиллярной конвекции с использованием относительно простых постановок задач. Знание основных характеристик термокапиллярной конвекции способствует лучшему пониманию ее роли в конкретных технологических процессах.

3.2.1. Математическая модель

Коэффициент поверхностного натяжения может изменять свое значение в зависимости от целого ряда факторов [2]. Ограничимся рассмотрением зависимости только от температуры и/или концентрации, т. е. термокапиллярной и капиллярно-концентрационной конвекции: $\sigma = \sigma(T, c)$, что представляет наибольший интерес для широкого круга практических задач.

Предполагая малые изменения температуры и концентрации примеси, ограничиваясь линейными членами, можно записать

$$\sigma = \sigma(T_0, c_0) + \frac{\partial \sigma}{\partial T} (T - T_0) + \frac{\partial \sigma}{\partial c} (c - c_0), \quad (3.6)$$

где T_0, c_0 — характерные значения температуры и концентрации, выбор которых зависит от конкретной задачи. Как правило, в

качестве T_0 и c_0 задаются средние значения температуры и концентрации примеси в области.

Выберем в качестве масштаба длины характерный размер L , скорости — v/L , тогда масштаб времени определится как $\tau = L^2/v$, безразмерные температуру и концентрацию определим как $\theta = (T - T_0)/(T_{\max} - T_0)$, $C = (c - c_0)/(c_{\max} - c_0)$ и, выполнив переход к функции тока и завихренности, получим следующую систему безразмерных уравнений:

$$\begin{aligned}\partial \omega / \partial t + (U\omega)_x + (V\omega)_y &= \Delta \omega + \text{Gr} (\theta_y \cos \hat{gx} - \theta_x \sin \hat{gx}) + \\ &+ \text{Gr}_c (C_y \cos \hat{gx} - C_x \sin \hat{gx}) + \partial F_y / \partial x - \partial F_x / \partial y,\end{aligned}\quad (3.7)$$

$$\psi_{xx} + \psi_{yy} = -\omega, \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (U\theta)_x + (V\theta)_y = \frac{1}{\text{Pr}} (\theta_{xx} + \theta_{yy}), \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (UC)_x + (VC)_y = \frac{1}{\text{Sc}} (C_{xx} + C_{yy}). \quad (3.10)$$

В системе уравнений (3.7)–(3.10) через U и V обозначены проекции безразмерной скорости на оси x и y соответственно. Функция тока ψ и вихрь ω связаны с компонентами скорости соотношениями

$$U = \partial \psi / \partial y, \quad V = -\partial \psi / \partial x, \quad \omega = \partial V / \partial x - \partial U / \partial y.$$

В уравнения (3.7)–(3.10) входят безразмерные критерии, определяющие задачу. Это тепловое $\text{Gr} = g\beta_t \Delta TL^3/v^2$ и концентрационное $\text{Gr}_c = \beta_c g \Delta c L^3/v^2$ числа Грасгофа, число Прандтля $\text{Pr} = v/a$ и число Шмидта $\text{Sc} = v/D$. Последний критерий иногда называют концентрационным или диффузионным числом Прандтля.

Для уравнений (3.7), (3.8) на твердых участках границы, которые мы считаем неподвижными, задаются условия непротекания и прилипания:

$$\psi = \partial \psi / \partial n = 0. \quad (3.11)$$

На фиксированной свободной поверхности l левое условие (3.11) также выполняется, а вместо второго условия из непрерывности тензора напряжений следует

$$\partial^2 \psi / \partial n^2 = -\omega = M_t \partial T / \partial l + M_c \partial C / \partial l, \quad (3.12)$$

где $M_t = M_n / \text{Re Pr}$, $M_c = M_n / \text{Re Sc}$.

3.2.2. Термокапиллярная конвекция в прямоугольных каналах

Рассмотрим капиллярную конвекцию в канале прямоугольного сечения. Пусть средняя глубина заполнения жидкостью H , длина канала L , в поперечном направлении канал неограничен

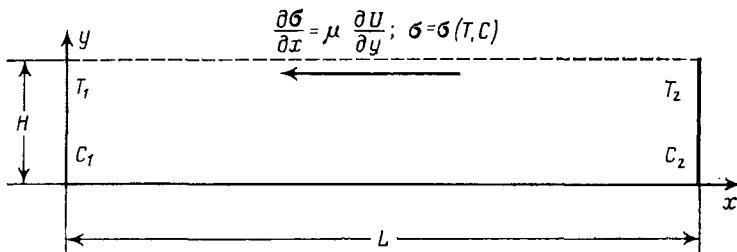


Рис. 3.16. Постановка задачи о капиллярной конвекции

(рис. 3.16). Дно канала и свободную поверхность считаем теплоизолированными и непроницаемыми для примеси, растворенной в основной жидкости. Боковые границы канала поддерживаются при постоянных и различных температурах $T_1 < T_2$, примесь поступает в канал и удаляется из раствора также только через боковые границы, причем на них заданы постоянные значения концентрации $c_1 > c_2$. При таких условиях вдоль свободной поверхности поддерживаются постоянные перепады концентрации и температуры. В качестве масштаба длины выберем среднюю глубину жидкости в канале H , безразмерную температуру и концентрацию примеси определим как

$$\theta = (T - T_1) / (T_2 - T_1), \quad C = (c - c_2) / (c_1 - c_2),$$

где индексы 1 и 2 соответствуют левой и правой боковым границам слоя.

Условия на боковых границах для безразмерных температуры и концентрации в этом случае имеют вид

$$\theta_1 = 0, \quad \theta_2 = 1, \quad C_1 = 1, \quad C_2 = 0. \quad (3.13)$$

Ось x направим вдоль слоя, ось y — по направлению внешней нормали к свободной поверхности жидкости, которую в данном случае будем считать плоской и недеформируемой. Течение жидкости и перенос тепла и примеси определяются из системы уравнений (3.7) — (3.10) с условиями (3.11) для функции тока и (3.12) для завихренности на соответствующих участках границы области.

Условия теплоизоляции и непроницаемости на свободной поверхности и дне канала для растворенной компоненты выглядят следующим образом:

$$\theta_y|_{y=0} = C_y|_{y=0} = 0, \quad \theta_y|_{y=1} = C_y|_{y=1} = 0. \quad (3.14)$$

Для упрощения задачи предположим отсутствие силы тяжести $g = 0$ и $C_1 = C_2$, т. е. концентрация примеси постоянна во всем объеме жидкости. Ограничим рассмотрение случаем заданного краевого угла $\alpha = \pi/2$, тогда исходный профиль свободной поверхности будет плоским.

Решение задачи зависит от числа Прандтля $\text{Pr} = v/a$, длины слоя $A = L/H$ и теплового числа Марангони $Mn = \frac{\partial\sigma}{\partial T}(T_2 - T_1)L/\rho va$.

Квадратная область. Особенности термокапиллярной конвекции рассмотрим на примере квадратной области [71, 73]. Как показали предварительные расчеты [71], структура течения и поля температуры практически не зависят от числа Прандтля, а определяются только числом Марангони. Интенсивность течения в области зависит от числа Прандтля и параметра $M_t = Mn/\text{Pr}$. Как легко видеть, связь между параметром M_t и числом Марангони аналогична связи между числами Грасгрофа и Рэлея, являющимися основными критериями термогравитационной конвекции. Результаты, излагаемые в данном подразделе, получены для случая $\text{Pr} = 1$.

Для расчета уравнений переноса завихренности (3.7) и температуры (3.9) применена явная двухслойная схема Аракавы первого порядка точности по времени и второго порядка точности по пространственным переменным (1.16). Для расчета уравнения (3.8) использована программа FHS11 из пакета программ [15]. Расчеты выполнены на равномерных сетках, содержащих от 10^3 (33×34) до $4 \cdot 10^3$ (65×66) узлов. Время счета одного варианта изменялось от 20 мин до 1,5 ч в зависимости от числа Марангони и разностной сетки на ЭВМ ЕС-1055М, причем разностная схема (1.16) реализована для матричного модуля (МАМО), позволяющего поднять быстродействие ЭВМ на простых операциях до 2—4 млн операций в секунду (см. также разд. 2.1).

В расчетах контролировался баланс потока тепла через нагретую и холодную границы области, точность выполнения которого снижалась по мере роста числа Марангони. При максимальном числе Марангони $Mn = 1,28 \cdot 10^4$ дисбаланс потока тепла не превышал 1 %.

При термокапиллярной конвекции движение жидкости обусловлено неоднородностью распределения температуры на свободной поверхности. В связи с этим особый интерес представляет анализ распределения температуры вдоль свободной поверхности.

На рис. 3.17, *a* приведена зависимость градиента температуры на свободной поверхности у горячей (кривая 1) и холодной (кривая 2) границ области от числа Марангони. При числах Марангони $Mn < 10^2$ градиент температуры на свободной поверхности у нагретой границы уменьшается с ростом Mn . При $Mn = 10^2$ этот градиент достигает минимального значения $\left.\frac{\partial\theta}{\partial x}\right|_{y=1} = 0,75$, с дальнейшим увеличением числа Марангони начинается его рост. Только при $Mn = 10^3$ градиент температуры на свободной поверхности у нагретой границы достигает значения 1. Градиент температуры на свободной поверхности жидкости у холодной границы увеличивается непрерывно с ростом числа Марангони.

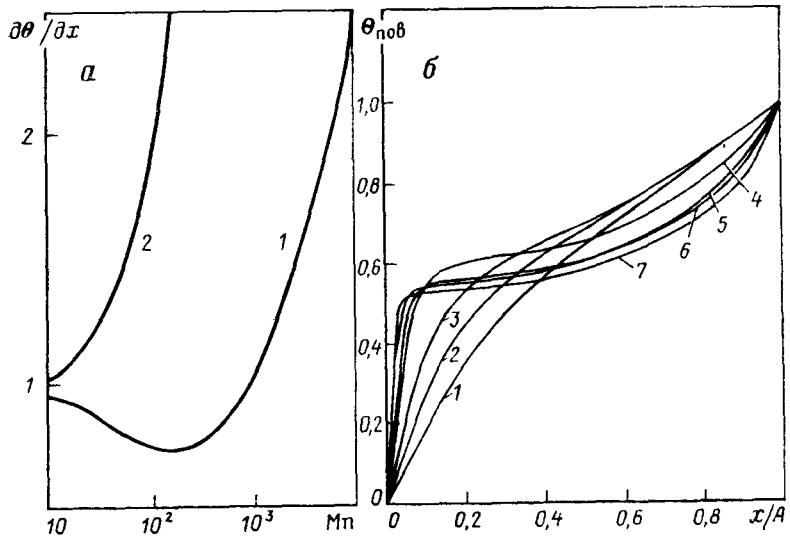
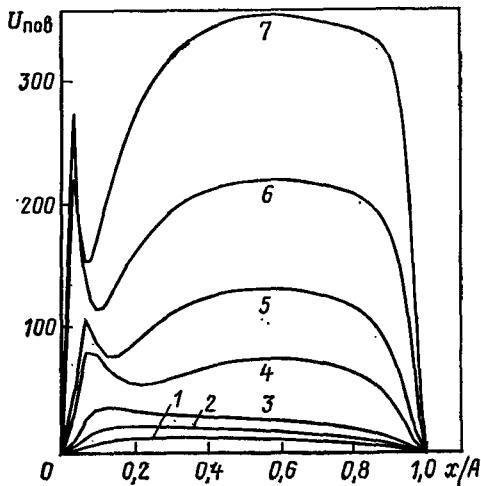


Рис. 3.17. Зависимости градиента температуры вдоль свободной поверхности от числа Марангони (а) и изменение температуры на свободной поверхности при различных числах Марангони (б) в квадратной области

а: 1 — у нагретой, 2 — у холодной границы слоя; б: число Mn равно:
 1 — 10^2 , 2 — $2 \cdot 10^2$, 3 — $4 \cdot 10^2$, 4 —
 $1,6 \cdot 10^3$, 5 — $3,2 \cdot 10^3$, 6 — $6,4 \cdot 10^3$,
 7 — $1,28 \cdot 10^4$

Рис. 3.18. Распределение скорости на свободной поверхности при различных числах Марангони в квадратной области
 1—7 — то же, что на рис. 3.17, б



Происходит также качественное изменение распределения температуры вдоль свободной поверхности (рис. 3.17, б). При малых числах Марангони это распределение имеет вид дуги, выгнутой вверх. При числах $Mn > 1,6 \cdot 10^3$ распределение температуры приобретает характерный S-образный вид, формируются участки резкого перепада температуры на свободной поверхности у изотермических границ слоя, градиент температуры в центральной части свободной поверхности существенно меньше. При $Mn < 1,6 \cdot 10^3$ около 60% полного температурного перепада вдоль поверхности сосредоточено в зоне большого градиента у

холодной границы слоя, при $Mn=1,6 \cdot 10^3$ начинается снижение этого перепада, и при $Mn=1,28 \cdot 10^4$ он уменьшается до $0,5\Delta\theta$.

Благодаря такому изменению температуры в зависимости от числа Марангони распределение горизонтальной компоненты скорости вдоль свободной поверхности также претерпевает существенную перестройку (рис. 3.18). При числах $Mn < 8 \cdot 10^2$ на этом распределении имеется один максимум, расположенный у холодной границы области, значение которого непрерывно увеличивается с ростом числа Марангони, а сам он смещается к холодной границе слоя. Образование и поведение этого максимума скорости обусловлено участком градиента температуры у холодной границы области.

При числе $Mn=8 \cdot 10^2$ на профиле скорости появляется точка перегиба (кривая 2), а при дальнейшем росте числа Марангони формируется второй максимум скорости, значение которого при $Mn=1,6 \cdot 10^3$ (кривая 4) сравнивается с первым, а в дальнейшем превышает его. С увеличением числа Марангони этот максимум скорости практически не меняет своего положения и находится на расстоянии 0,4 от нагретой границы слоя. Возникновение второго максимума скорости обусловлено формированием участка градиента температуры у нагретой границы области.

В отличие от гравитационной тепловой конвекции, течение и поле температуры при которой имеют диагональную симметрию, при термокапиллярной конвекции поля течения и температуры, как это видно из рис. 3.19, на котором изображены линии тока и изотермы, симметрией не обладают. Особенно наглядно асимметричный характер термокапиллярной конвекции выражен на картинах изотерм.

По искривлению изотерм можно судить о глубине проникновения термокапиллярной конвекции. При числах $Mn < 1,6 \cdot 10^3$ перемешивание жидкости носит приповерхностный характер, причем глубина проникновения конвекции у холодной границы слоя больше, чем у нагретой. При $Mn \geq 1,6 \cdot 10^3$ термокапиллярная конвекция оказывает заметное влияние на распределение температуры по всей глубине слоя жидкости.

При числах $Mn \geq 6,4 \cdot 10^3$ происходит значительное выхолаживание объема жидкости, обусловленное тем, что нагретая жидкость расположена в основном вблизи горячей границы слоя (см. рис. 3.19). Значения средней по объему жидкости температуры $\bar{\theta}$ при различных числах Марангони приведены в табл. 3.3. Там же даны значения максимальной функции тока, координаты центра основного вихря, значение максимальной скорости на свободной поверхности, а также разностная сетка, примененная в конкретном варианте.

Центр вихря в рассматриваемом диапазоне числа Марангони слабо перемещается вдоль слоя, при числах $Mn > 6,4 \cdot 10^3$ начинается его перемещение по направлению градиента температуры с одновременным удалением от свободной поверхности, что

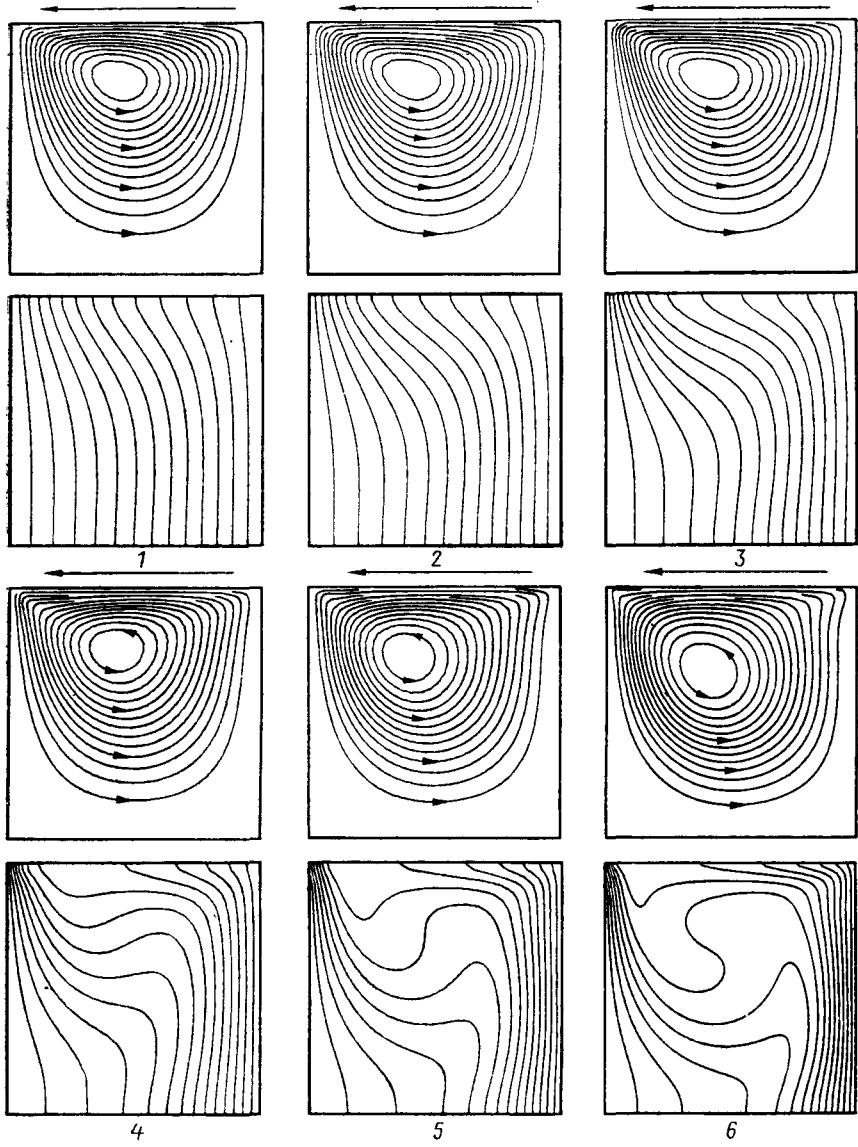


Рис. 3.19. Линии тока (вверху) и изотермы (внизу) при разных числах Марангони при термокапиллярной конвекции в квадратной области
1—6 — то же, что на рис. 3.17, б. Стрелкой показано направление скорости на свободной поверхности

Таблица 3.3. Значения параметров в задаче термокапиллярной конвекции в квадратной области при различных числах Марангони

Mn	Ψ_{\max}	x	y	U_{\max}	$\bar{\theta}$	Сетка
10^2	1,062	0,424	0,781	12,15	0,495	33×34
$2 \cdot 10^2$	1,728	0,424	0,781	21,16	0,485	33×34
$4 \cdot 10^2$	2,667	0,394	0,781	35,7	0,467	33×34
$1,6 \cdot 10^3$	7,03	0,424	0,75	80,18	0,427	33×34
$3,2 \cdot 10^3$	12,87	0,394	0,719	132,4	0,407	33×34
$6,4 \cdot 10^3$	22,57	0,4	0,656	221,4	0,398	65×66
$1,28 \cdot 10^4$	37,57	0,431	0,625	355,2	0,391	65×66

качественно соответствует перемещению центра вихря в задаче о течении в каверне [200].

Благодаря отсутствию симметрии течения распределение местных потоков тепла на холодной и нагретой границах слоя различно (рис. 3.20). Местный поток тепла на холодной границе максимальен непосредственно на свободной поверхности и монотонно уменьшается с глубиной, причем вблизи дна во всем рассмотренном диапазоне числа Марангони он был ниже, чем при переносе тепла теплопроводностью. Поведение местного потока тепла на холодной границе вблизи дна области напоминает поведение местного потока на свободной поверхности у нагретой границы. С увеличением числа Марангони местный поток тепла на холодной границе у дна слоя уменьшается, достигает минимума, далее начинается его рост.

Местный поток тепла через нагретую границу слоя распределен значительно более равномерно, имеются два небольших максимума, один из которых расположен на глубине 0,05 под свободной поверхностью, а второй на 0,6 глубины слоя, причем второй максимум превышает первый. Абсолютный минимум местного потока тепла через нагретую границу слоя расположен непосредственно на свободной поверхности.

На рис. 3.21 приведена зависимость интегрального потока тепла $Nu = \int_0^1 \theta_x dy$ через слой жидкости от числа Марангони.

Как и для любого другого механизма перемешивания, по виду этой зависимости можно выделить характерные режимы термокапиллярной конвекции.

При числах $Mn \leq 80$ перенос тепла через слой слабо отличается от теплопроводностного, роль конвекции сводится в основном к перераспределению местных потоков тепла через нагретую и холодную границы области. Граница режима теплопроводности $Mn \approx 80$ близка к границе потери устойчивости состояния покоя при подогреве снизу [259]. При $80 < Mn < 10^3$ происходит переход от режима теплопроводности к режиму развитой

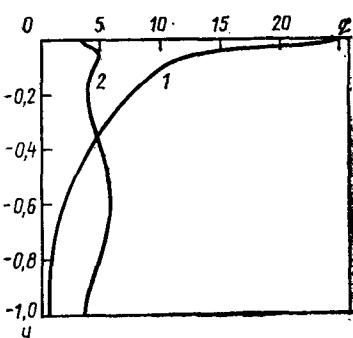


Рис. 3.20. Местный поток тепла q на холодной (1) и нагретой (2) границах области при термокапиллярной конвекции в квадратной области при $Mn = 6,4 \cdot 10^3$

Рис. 3.21. Зависимость интегрального потока тепла через слой жидкости от числа Марангони в квадратной области

I, II, III — режим теплопроводности, переходный режим и режим развитой термокапиллярной конвекции соответственно

термокапиллярной конвекции, нижней границей которого ($Mn \approx 10^3$), видимо, можно считать момент, когда градиент температуры на свободной поверхности у нагретой границы достигает значения $\theta_x = 1$.

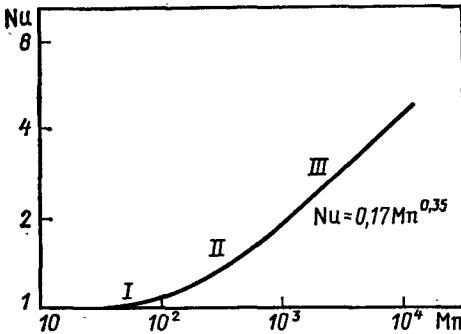
В режиме развитой термокапиллярной конвекции зависимость интегрального потока тепла через слой от числа Марангони хорошо аппроксимируется выражением

$$Nu = 0,17 Mn^{0,35},$$

что согласуется с результатом работы [278], где аналитически в приближении пограничного слоя, а также численно было установлено, что в режиме интенсивной термокапиллярной конвекции в квадратной области $Nu \sim Mn^{0.35}$.

Различные удлинения плоского слоя. При аналитическом исследовании термокапиллярной конвекции в ограниченных областях значительные трудности возникают вследствие необходимости введения большого количества подобластей. Отдельно рассматриваются области у торцов слоя, причем из-за отсутствия симметрии течения решения у холодной и нагретой боковых границ различны, вводятся пограничные слои у дна области и свободной поверхности, ищется решение в ядре слоя, далее осуществляется сшивка решений во всех областях.

Сложность получения аналитического решения значительно уменьшается, если предположить, что на большей части длины слоя течение и распределение температуры могут быть определены, исходя из точного решения типа [16, 87]. При этом достаточно построить решение лишь у торцов слоя, как, например, выполнено в [263].



Такой подход упрощает задачу исследования устойчивости термокапиллярных течений при заданном боковом градиенте температуры [265], но остается открытым вопрос о границах применимости решений типа [16, 87] в зависимости от отношения сторон слоя и числа Марангони.

Общей особенностью точных решений для термокапиллярной конвекции в бесконечных слоях жидкости является постоянство продольного градиента температуры по всей толщине слоя. Продольная компонента скорости при этом имеет неизменный параболический профиль в различных вертикальных сечениях, скорость непосредственно на свободной поверхности постоянна.

На рис. 3.22 приведены распределения скорости и температуры вдоль свободной поверхности при $M_p = 10^2$ для отношения сторон $A = 1 \div 5$. По мере увеличения отношения сторон слоя распределение скорости вдоль свободной поверхности приближается к постоянному, а распределение температуры становится практически линейным уже при $A = 3$. Распределение температуры на различных глубинах вдоль слоя, представленное на рис. 3.23, *a* в виде $\theta' = \theta - x/A$ для $A = 4$ при $M_p = 2 \cdot 10^2$, имеет протяженный участок, отмеченный вертикальными пунктирными линиями, где градиент температуры неизменен по всей толщине слоя. Профили горизонтальной компоненты скорости в сечениях $A/4$, $A/2$, $3A/4$ (рис. 3.23, *b*) хорошо согласуются с точным профилем скорости, причем для $A \geq 7$ эти распределения совпадают с графической точностью.

В рассматриваемом режиме термокапиллярная конвекция слабо влияет на поле температуры, ее роль сводится в основном к перераспределению потоков тепла на изотермических торцах слоя. Таким образом, при $A \geq 3$, $M_p \approx 10^2$ вполне оправданно применение точных решений для описания течения в центральной части слоя.

Однако с ростом числа Марангони структура течения существенно меняется, как это видно из рис. 3.24, на котором приведены линии тока и изотермы при различных числах Марангони для $A = 4$. При $M_p = 8 \cdot 10^2$ исходное одновихревое течение теряет устойчивость, возникают стационарные вторичные структуры, направление циркуляции в которых совпадает с направлением основного течения. С дальнейшим ростом числа Марангони происходит увеличение продольного размера вихря, расположенного у нагретой границы области, соответственно вихрь у холодной границы слоя уменьшается. При $M_p = 6,4 \cdot 10^3$ происходит восстановление одновихревой структуры в большей части слоя.

Распределение температуры в продольных сечениях слоя (рис. 3.25, *a*) и продольной компоненты скорости в вертикальных сечениях (рис. 3.25, *b*) во вторичном одновихревом режиме имеет сложный характер, отличный от точного решения. В этом режиме термокапиллярная конвекция значительно интенсифицирует теплообмен, влияние торцов оказывается на всем протяжении слоя.

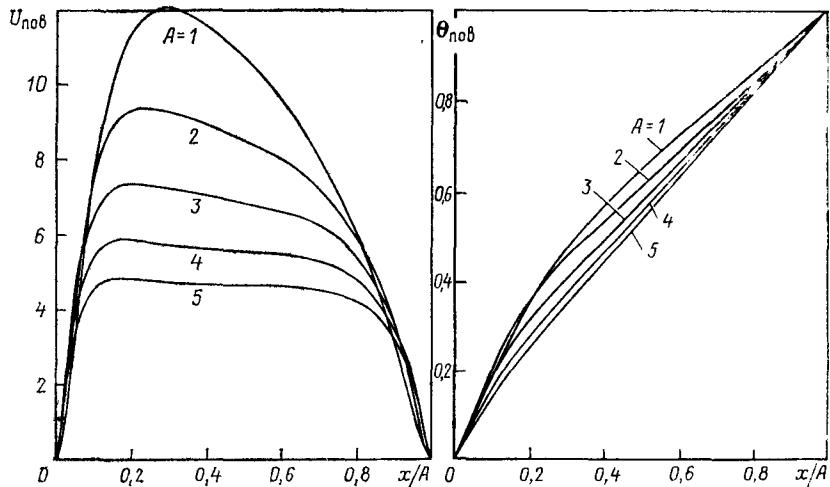


Рис. 3.22. Распределения скорости и температуры вдоль свободной поверхности в режиме теплопроводности при термокапиллярной конвекции ($M_p = 10^2$)

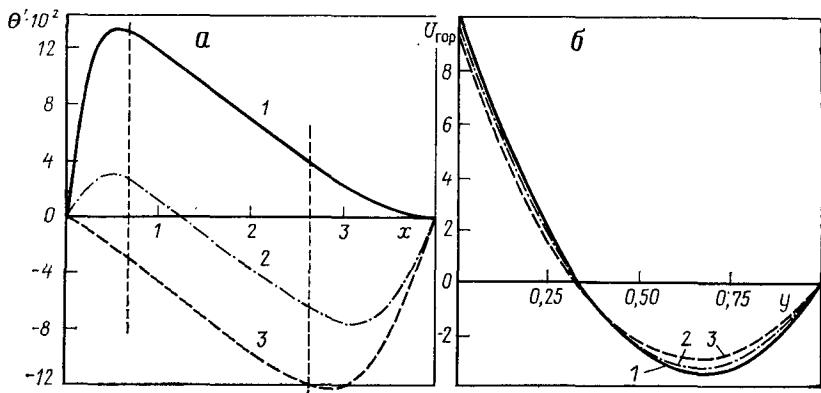


Рис. 3.23. Распределения температуры на разных глубинах (а) и горизонтальной компоненты скорости в разных вертикальных сечениях (б) при $M_p = 2 \cdot 10^2$, $A = 4$

а: 1 — $y=1$, 2 — $0,5$, 3 — 0 ; б: 1 — $x=A/4$, 2 — $A/2$, 3 — $3A/4$

Аналогичное изменение структуры течения обнаружено при $A \geq 3$, причем для $A \leq 5$ удалось проследить восстановление одновихревой структуры течения. Диаграмма режимов течения, установленная в расчетах, приведена на рис. 3.26.

С ростом отношения сторон слоя происходит постепенное увеличение критического числа Марангони, при котором проявляется указанная неустойчивость структуры течения. При $A \geq 8$ исходное одновихревое течение разбивается на три ячейки, число которых уменьшается до двух при $M_p \geq 6,4 \cdot 10^3$.

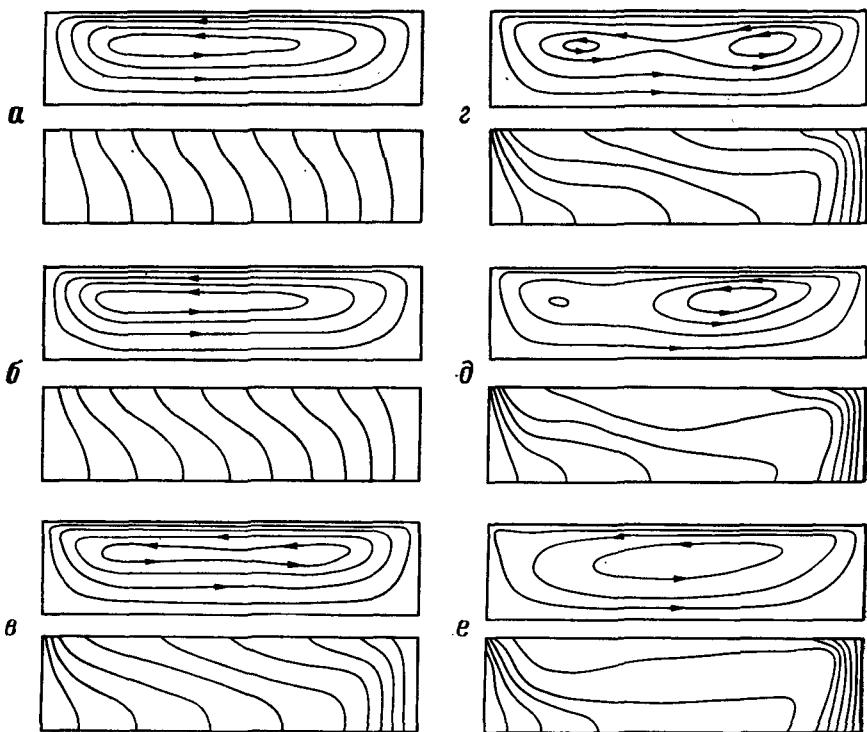


Рис. 3.24. Изменения структуры течения (вверху) и поля температуры (внизу) при термокапиллярной конвекции с ростом числа Марангони при $A=4$. Число M_p равно: $a = 10^2$; $b = 2 \cdot 10^2$; $c = 8 \cdot 10^2$; $d = 1,6 \cdot 10^3$; $e = 3,2 \cdot 10^3$; $f = 6,4 \cdot 10^3$

При проведении направленной кристаллизации в условиях невесомости происходит непрерывное изменение отношения сторон слоя жидкости, изменяется также число Марангони. В случае неудачного выбора параметров процесса перестроение структуры течения, аналогичное выявленному в расчете, может приводить к колебательным конвективным течениям, служащим основной причиной микронеоднородности в кристаллах.

Для приложений представляет интерес зависимость максимальной функции тока от отношения сторон слоя при различных числах Марангони, приведенная на рис. 3.27. Особенностью этого распределения является наличие максимума интенсивности течения при $A=2$ во всем рассмотренном диапазоне значений числа Марангони.

Качественно этот эффект можно объяснить следующим образом. В рассматриваемой задаче одинаковым числом Марангони соответствует фиксированный перепад температуры вдоль свободной поверхности жидкости при всех отношениях сторон слоя. С увеличением параметра A средний градиент температу-

ры вдоль слоя уменьшается, но одновременно снижается тормозящее действие торцов слоя. Взаимодействие этих факторов и может быть причиной максимума интенсивности течения при некотором отношении сторон.

При $M_p > 3,2 \cdot 10^3$, $A \geq 8$ зависимость максимальной функции тока от отношения сторон становится немонотонной, что, видимо, обусловлено перестройкой структуры течения в этой области режимных параметров. Аналогичная немонотонность прослеживается и на ряде других зависимостей при термокапиллярной конвекции.

Важной характеристикой любого конвективного течения является зависимость интегрального потока тепла через слой жидкости от режимных параметров, также приведенная на рис. 3.27. Число Нуссельта, определенное в данном случае как

$$Nu = A \int_0^1 \frac{\partial \theta}{\partial x} dy, \quad (3.15)$$

при фиксированном числе M_p имеет максимум, положение которого с увеличением числа Марангони смещается в сторону больших удлинений слоя. При $M_p \geq 3,2 \cdot 10^3$ зависимость Nu от отно-

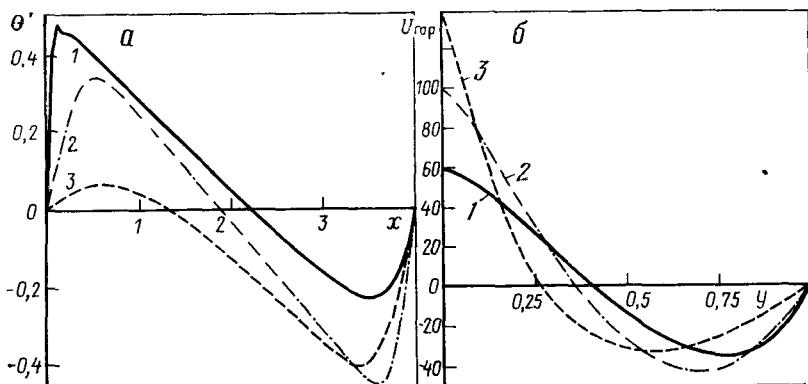


Рис. 3.25. Распределение температуры на разных глубинах (а) и горизонтальной компоненты скорости в разных вертикальных сечениях (б) при $M_p = 6,4 \cdot 10^3$, $A = 4$

I—3 — то же, что на рис. 3.23

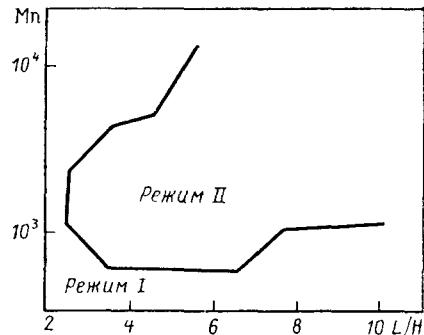


Рис. 3.26. Диаграмма режимов течения при термокапиллярной конвекции

I — одновихревое течение,

II — многовихревое течение

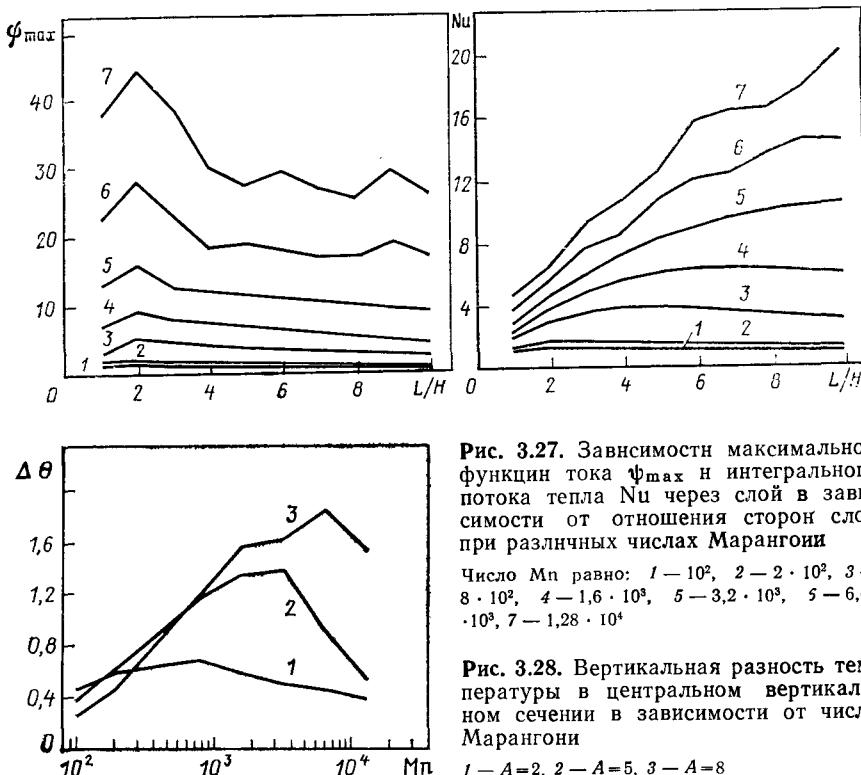


Рис. 3.27. Зависимости максимальной функции тока Φ_{\max} и интегрального потока тепла Nu через слой в зависимости от отношения сторон слоя при различных числах Марангони

число Mn равно: 1 — 10^2 , 2 — $2 \cdot 10^2$, 3 — $8 \cdot 10^2$, 4 — $1.6 \cdot 10^3$, 5 — $3.2 \cdot 10^3$, 6 — $6.4 \cdot 10^3$, 7 — $1.28 \cdot 10^4$

Рис. 3.28. Вертикальная разность температуры в центральном вертикальном сечении в зависимости от числа Марангони

1 — $A=2$, 2 — $A=5$, 3 — $A=8$

шения сторон становится немонотонной. Число Нуссельта, определенное по формуле (3.15), выражает отношение потока тепла в конвективном режиме к потоку тепла в режиме теплопроводности и служит мерой интенсификации теплообмена при термокапиллярной конвекции. Как видно из рис. 3.27, при числе $Mn = 1.28 \cdot 10^4$ поток тепла через слой жидкости при $A = 1$ увеличился в 4,5 раза, а при $A = 10$ — в 20,8 раза.

В [138] был сформулирован эффект максимума температурного расслоения для гравитационной тепловой конвекции. Сущность эффекта заключается в том, что при заданной геометрии при некотором числе Рэлея разность температуры в направлении вектора силы тяжести между границами достигает максимального значения. В [255] было показано, что аналогичный эффект имеет место и при термокапиллярной конвекции.

Излагаемые здесь расчеты подтверждают и уточняют выводы работы [255] об эффекте максимума температурной неоднородности при термокапиллярной конвекции. На рис. 3.28 приведена зависимость разности температуры в центре слоя между свободной поверхностью и дном слоя жидкости при A , равном 2, 5, 8, от числа Марангони.

Для большей наглядности вертикальная разность температуры нормирована на продольный градиент температуры в режиме теплопроводности. Можно отметить, что с увеличением отношения сторон слоя жидкости положение максимальной разности температуры смещается в сторону больших чисел Марангони. Немонотонный характер зависимости $\Delta\theta(Mn)$ при $A \geq 8$ не позволяет уверенно определить положение максимума.

3.2.3. Взаимодействие термокапиллярной и капиллярно-концентрационной конвекций

При исследовании взаимодействия термокапиллярной и капиллярно-концентрационной конвекций по аналогии с [128] можно ввести классификацию различных механизмов капиллярной конвекции в зависимости от ориентации потоков тепла и примеси относительно свободной поверхности жидкости, внутренняя нормаль к которой играет роль, аналогичную роли вектора силы тяжести при гравитационной конвекции. Действительно, механическое равновесие возможно только тогда, когда векторы потоков тепла и массы параллельны этой нормали; в случае термокапиллярной конвекции равновесие оказывается устойчивым, если поток тепла параллелен нормали и направлен в ту же сторону, и неустойчивым при их встречной направленности, совершенно аналогично подогреву сверху и снизу для гравитационной конвекции.

В зависимости от ориентации потоков тепла и массы относительно свободной поверхности жидкости можно выделить несколько основных ситуаций, изображенных на рис. 3.29. Механическое равновесие возможно в ситуациях *a* и *b*. В случае, изображенном на рис. 3.29, *c*, механическое равновесие невозможно и течение возникает всегда. Отметим, что ситуации *c* и *g* неравнозначны. В первой из них можно ожидать колебательный, а во второй — монотонный характер развития течения.

Наиболее важным для практики, на наш взгляд, представляется случай *a*. Эта ситуация характерна для многих технологических процессов выращивания монокристаллов. Действительно, фронт кристаллизации, как правило, оттесняет легирующую примесь, т. е. поток массы направлен от фронта кристаллизации, а поток тепла направлен из расплава в растущий кристалл. Наличие примеси в расплаве основного вещества обычно приводит к снижению коэффициента поверхностного натяжения. При малой концентрации примеси коэффициент поверхностного натяжения сильно зависит от состава, при больших концентрациях примеси зависимость $\sigma(C)$ значительно менее выражена. В современных полупроводниковых материалах применяется низкий уровень легирования, соответствующий участку сильной зависимости поверхностного натяжения от состава. В этих условиях концентрационное число Марангони Mn_c может превышать тепловое.

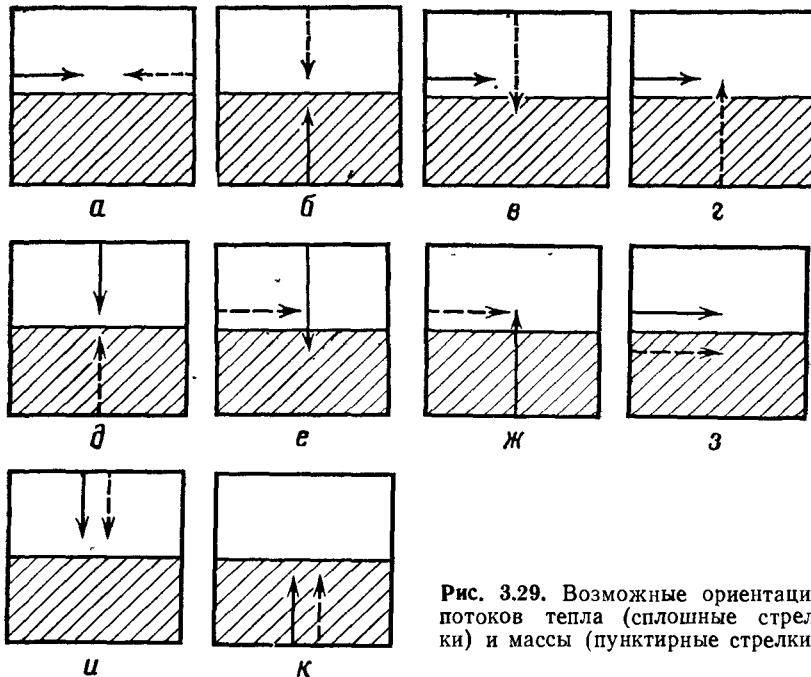


Рис. 3.29. Возможные ориентации потоков тепла (сплошные стрелки) и массы (пунктирные стрелки)

Рассмотрим взаимодействие термокапиллярной и капиллярно-концентрационной конвекций в прямоугольной области с отношением сторон $A=8$. Пусть на боковых границах поддерживаются постоянные и различные по величине значения температуры и концентрации. Движение жидкости и перенос тепла и массы определяются системой уравнений (3.7)–(3.10). Границные условия для функции тока и завихренности имеют вид (3.11), (3.12) на соответствующих поверхностях. Условия для безразмерных температуры и концентрации на боковых границах слоя имеют вид (3.13), на свободной поверхности и дне области — (3.14).

Для полупроводниковых материалов характерны низкие числа Прандтля ($\text{Pr} \ll 1$) и высокие числа Шмидта ($\text{Sc} \gg 1$). В расчетах было принято $\text{Sc}=100$, $\text{Pr}=0,1$. Расчеты выполнены для случая $M_p \gg M_t$, однако для определения ведущего механизма конвекции необходимо сравнивать параметры M_t и M_c , входящие в граничные условия (3.12) на свободной поверхности. При постановке задачи было принято $M_t=10^3$, $M_c=1,1 \cdot 10^3$, т. е. относительно небольшое преобладание капиллярно-концентрационной конвекции. При $M_t=M_c$, как это было отмечено выше, механическое равновесие неустойчиво вследствие различия чисел Pr и Sc , что для гравитационной конвекции аналогично случаю устойчивой стратификации по солености при подогреве снизу.

В качестве начальных условий были заданы линейные распределения температуры и концентрации и отсутствие движения.

Результаты расчетов, рассматриваемые ниже, в отличие от п. 3.22 получены с применением для расчета уравнений переноса (3.7), (3.9), (3.10) энергетически нейтральной неявной схемы метода переменных направлений (1.14), уравнение (3.8) решалось с помощью программы быстрого преобразования Фурье из пакета программ, краткое описание которого дано в разд. 6.1. Расчеты выполнены на равномерной сетке 17×129 .

Предварительные расчеты показали, что возникающее течение практически не влияет на распределение температуры, которое слабо отклоняется от линейного. В связи с этим из дальнейших расчетов уравнение (3.9) было исключено, а граничное условие (3.12) на свободной поверхности было преобразовано к виду

$$\omega_r = M_c \partial C / \partial x + M_t.$$

Граничные условия на твердых поверхностях реализованы по методике [58, 142].

Хотя, как уже отмечено выше, температурное поле в этой задаче практически не отличается от исходного линейного профиля, структуры полей течения и концентрации подвержены сложному автоколебательному процессу.

На рис. 3.30 приведена кинограмма развития автоколебаний. Возникающее на начальной стадии одновихревое течение (рис. 3.30, а), направление циркуляции которого против часовой стрелки обусловлено концентрационно-капиллярным эффектом, так же, как и в случае термокапиллярной конвекции, вызывает снижение градиента концентрации на свободной поверхности у правой границы слоя, где задано условие $C=1$. При достижении градиентом концентрации на свободной поверхности значения

$$\partial C / \partial x = -M_t / M_c$$

движение жидкости под этим участком свободной поверхности ослабевает, а при дальнейшем уменьшении градиента концентрации начинает сказываться влияние термокапиллярного эффекта: формируется вихрь, имеющий направление циркуляции по часовой стрелке и приостанавливающий дальнейшее падение градиента концентрации (рис. 3.30, б).

Довольно быстро течение становится автоколебательным (рис. 3.30, в, г). Основной структурой в этом режиме является пара сопряженных вихрей, один из которых вращается по часовой стрелке и обусловлен термокапиллярным эффектом, а второй вращается против часовой стрелки и связан с капиллярно-концентрационным эффектом.

Вихри поочередно образуются у границы $\theta=0$, $C=1$ и перемещаются к границе $\theta=1$, $C=0$, где постепенно разрушаются.

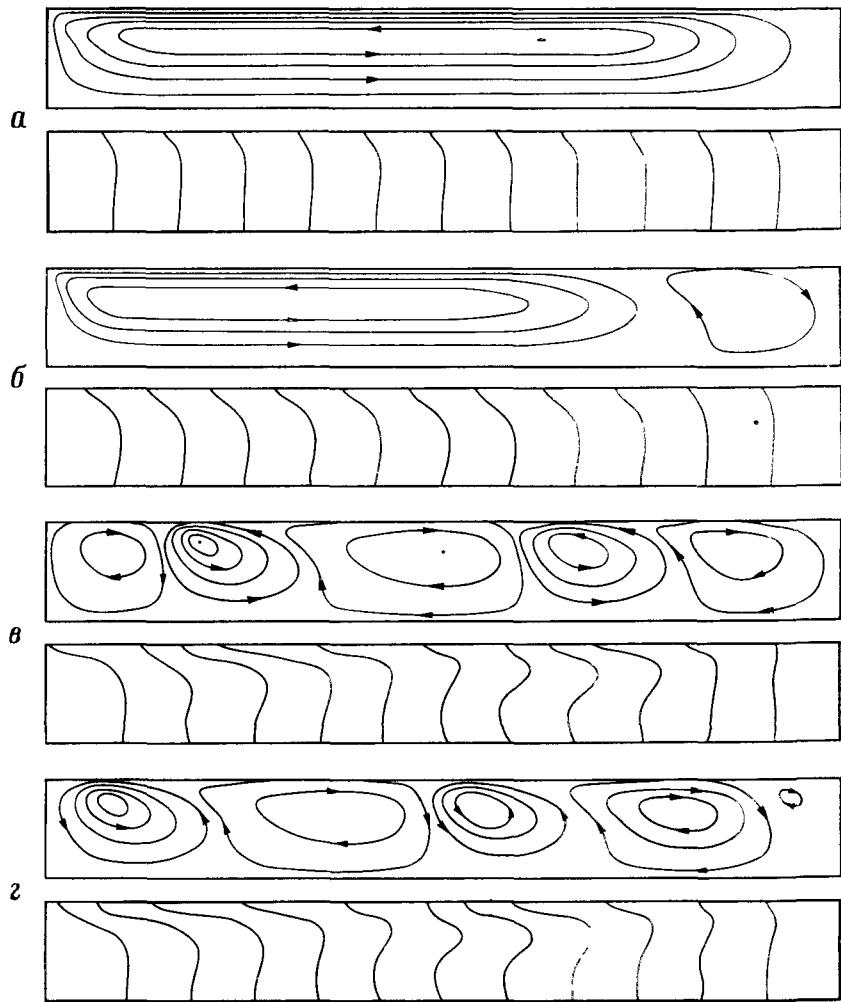


Рис. 3.30. Развитие течения при противодействии термокапиллярной и капиллярно-концентрационной конвекции

Вверху — линии тока, внизу — изоконцентраты, *а*, *б* — начальная стадия, *в*, *г* — автоколебательный режим

Более протяженным оказывается вихрь, обусловленный термо-капиллярным эффектом.

Масштаб сопряженной пары вихрей, определенный по полю пространственной корреляции функции тока, изменяется при перемещении ячеек в диапазоне от 3,2 до 4,1 безразмерных единиц длины. На профиле концентрации примеси вдоль свободной поверхности формируются характерные ступеньки, где градиент

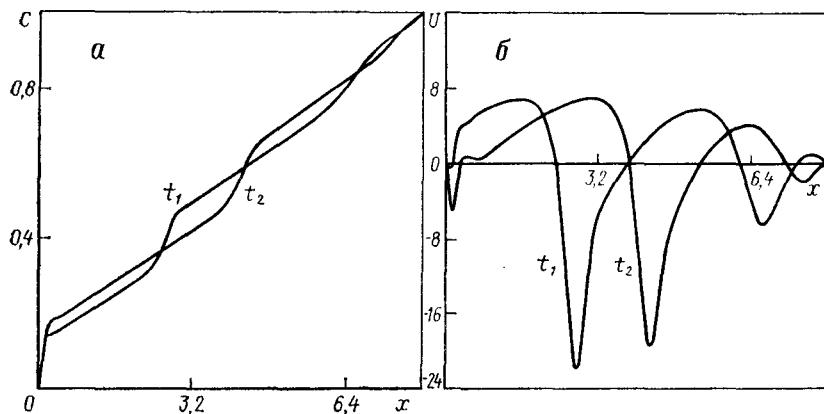


Рис. 3.31. Распределения концентрации (а) и скорости (б) вдоль свободной поверхности в различные моменты времени при автоколебательном режиме течения

концентрации превышает исходное значение, и протяженные участки плавного изменения концентрации (рис. 3.31, а). Профили скорости вдоль свободной поверхности для тех же моментов времени приведены на рис. 3.31, б. Скорость на свободной поверхности в «концентрационном» вихре более чем в 4 раза превышает скорость в «термокапиллярном» вихре.

Изолинии концентрации (см. рис. 3.30) показывают, что течение заметно влияет на распределение примеси в приповерхностном слое жидкости; вблизи дна на большой протяженности слоя градиент концентрации мало отличается от исходного.

Изложенную выше задачу можно рассматривать как модельную для случая горизонтальной направленной кристаллизации (см. разд. 4.2). В этом процессе взаимодействие термокапиллярной и капиллярно-концентрационной конвекций способно приводить к возникновению концентрационных колебаний вблизи фронта кристаллизации и, как следствие, вызывать значительную неоднородность состава кристалла у свободной поверхности.

Таким образом, при взаимодействии термокапиллярной и капиллярно-концентрационной конвекций возможно формирование автоколебательных режимов течения. Это важное отличие от гравитационной конвекции, где при взаимодействии тепловой и концентрационной конвекций образуются, как правило, стационарные структуры, размер которых определяется высотой плавучести.

3.3. ТЕПЛОВАЯ ГРАВИТАЦИОННАЯ КОНВЕКЦИЯ В ВЕРТИКАЛЬНЫХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ СОСУДАХ

3.3.1. Влияние конвекции на тепловой режим хранения жидкостей в сосудах

Многие технические устройства и технологические установки включают в свой состав цилиндрические емкости, заполненные жидкостью. В качестве примеров можно назвать хранилища сжиженных газов и жидких углеводородов, баки с криогенными жидкостями, накопители тепла в устройствах для утилизации солнечной энергии. Как правило, жидкость в таких емкостях подвергается различным тепловым воздействиям, под влиянием которых формируется поле температуры. Неоднородность прогрева жидкости может существенно влиять на эффективность работы накопителей солнечной энергии, ускорять рост давления в криогенных баках и приводить к другим, как полезным, так и нежелательным последствиям. Поэтому при создании и оптимизации технических объектов, включающих заполненные жидкостью емкости, необходимо уметь прогнозировать тепловой режим этих жидкостей.

Одним из наиболее важных физических процессов, определяющих тепловой режим хранения жидкостей в емкостях, является тепловая гравитационная конвекция. В целом конвекция оказывает довольно сложное влияние на пространственно-временную структуру поля температуры. Вместе с тем можно выделить два наиболее существенных эффекта. Во-первых, в условиях тепловой конвекции значительно повышается интенсивность теплопередачи от стенок емкости к жидкости, причем из-за ограниченности объема коэффициент теплопередачи может заметно отличаться от коэффициента теплопередачи для хорошо изученного случая конвекции около полубесконечной вертикальной плоской пластины. Во-вторых, конвекция приводит к появлению вертикального температурного расслоения, обусловленного тем, что прогретая около стенок и, следовательно, более легкая жидкость вслывает под действием сил плавучести и скапливается в верхней части бака. В результате температура верхних слоев жидкости оказывается выше температуры нижних слоев. Явление температурного расслоения оказывает сильное влияние на продолжительность бездренажного хранения криогенных жидкостей и сжиженных газов, так как приводит к усиленному испарению и быстрому росту давления в баке.

Изучению тепловой конвекции в цилиндрических емкостях посвящен ряд экспериментальных работ [88, 216, 229, 231]. Основное внимание в работах [216, 231] уделялось измерениям тепловых характеристик конвекции — вертикального профиля температуры или давления паров, которое связано с температурой на свободной поверхности жидкости. В работе [229], напро-

тив, измерялись только значения скорости. В условиях тепловой конвекции поля течения и температуры существенно влияют одно на другое. Поэтому измерения только тепловых или только динамических параметров недостаточно для детального понимания процесса, особенно при конвекции в ограниченном объеме, когда структура полей течения и температуры весьма сложна. В связи с этим особую актуальность для данного класса задач имеют методы математического моделирования, позволяющие получать наиболее полную информацию о пространственно-временной структуре конвекции.

Работы, в которых тепловой режим жидкостей в емкостях исследовался численно, можно условно разделить на две группы. В работах [26, 28, 80] наряду с конвекцией в жидкости учитываются другие факторы, влияющие на тепловой режим: перенос тепла в газовой или паровой подушке, перетоки тепла по стенкам сосуда, фазовые переходы, теплообмен в окружающей среде. Характерной особенностью этих работ является сложность используемых математических моделей, в частности большое количество определяющих параметров. В работах [27, 132, 139, 149, 182, 183, 185, 193] изучается только один процесс — тепловая конвекция в жидкости. При этом постановка задачи значительно упрощается, что позволяет проводить параметрические исследования и обобщать результаты численного моделирования. Кроме того, данный подход дает возможность гораздо шире варьировать определяющие параметры за счет применения более эффективных численных методов [149, 184, 185].

Ниже приводятся результаты, полученные на основе упрощенной постановки, без учета дополнительных факторов. Однако в целом ряде случаев такая математическая модель весьма близка к реальным условиям, поэтому приведенные результаты представляют интерес для практических приложений.

3.3.2. Математическая модель и режимы тепловой гравитационной конвекции

Рассматривается нестационарная тепловая гравитационная конвекция жидкости в вертикальном цилиндрическом сосуде радиусом R , частично заполненном до высоты L (рис. 3.32). Поверхность жидкости предполагается свободной (касательные напряжения на поверхности равны нулю) и плоской. Поля течения и температуры осесимметричны, угловая составляющая скорости отсутствует. К границам жидкости подводятся постоянные во времени и равномерно распределенные по днищу, боковой и свободной поверхностям тепловые потоки с удельными плотностями q_1 , q и q_2 соответственно. В начальный момент времени жидкость неподвижна и равномерно прогрета до температуры T_0 .

При приведении задачи к безразмерному виду в качестве характерного размера используется радиус сосуда, в качестве мас-

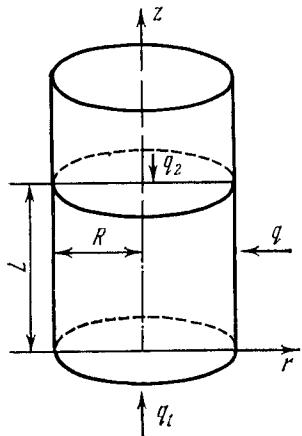


Рис. 3.32. Постановка задачи о конвекции в цилиндре

штабов скорости и времени принимаются величины a/R и R^2/a . Поскольку для данного класса задач на границах реализуются тепловые граничные условия второго рода, то характерный перепад температуры отсутствует. Поэтому в качестве масштаба температуры используется комплекс qR/λ . В этом случае безразмерные уравнения конвекции и граничные условия принимают вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial \omega}{\partial \text{Fo}} + U \frac{\partial \omega}{\partial r} + V \frac{\partial \omega}{\partial z} - \frac{U \omega}{r} \right) = \\ = \text{Ra} \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \omega}{\partial r} + \frac{r \partial^2 \omega}{\partial z^2} - \frac{\omega}{r^2}, \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \omega r, \end{aligned}$$

$$r \frac{\partial \theta}{\partial \text{Fo}} + \frac{\partial}{\partial r} (rU\theta) + \frac{\partial}{\partial z} (rV\theta) = \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) + r \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2},$$

$$\psi|_{r=0} = \psi|_{r=1} = \psi|_{z=0} = \psi|_{z=H} = 0,$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} \Big|_{r=0} = \frac{\partial \psi}{\partial z} \Big|_{z=0} = \omega|_{r=0} = \omega|_{z=H} = 0,$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=1} = 1,$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} \Big|_{z=0} = -q_d, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} \Big|_{z=H} = q_{\text{пов}},$$

$$\omega = \frac{\partial V}{\partial r} - \frac{\partial U}{\partial z}, \quad U = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad V = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r},$$

$$\theta = (T - T_0) \lambda / qR, \quad \text{Ra} = g \beta q R^4 / \nu a \lambda.$$

Здесь $q_d = q_1/q$ — поток на дне сосуда, $q_{\text{пов}} = q_2/q$ — поток на поверхности жидкости, $H = L/R$. Определяющими критериями подобия в задаче являются число Рэлея Ra , число Прандтля Pr , степень заполнения H и безразмерные тепловые потоки q_d и $q_{\text{пов}}$. Искомые параметры — безразмерные составляющие скорости (U — горизонтальная, V — вертикальная) и температура θ , которые зависят от определяющих критериев, а также от безразмерных координат (r, z) и времени (число Фурье Fo).

Численные исследования тепловой конвекции в сосудах на основе нестационарных уравнений Навье—Стокса в приближении Буссинеска сопровождались совершенствованием конечно-

разностных схем (см. также [122]). На первом этапе [132, 138, 139] применялись схемы с симметричной аппроксимацией конвективных членов (уравнение (1.13) при $\xi_1 = \xi_2 = 1$), итерационным решением уравнения для функции тока без оптимизации ($\sigma = \text{const}$ в (1.18)) и граничным условием для вихря (1.28). Это не позволяло проводить систематические расчеты при числах Рэлея выше 10^6 . Увеличение числа Рэлея в последующих работах [27, 149] стало возможным благодаря использованию схемы (1.13), методу расчета вихря на стенке (1.29) и применению БПФ (1.19)–(1.22) для расчета функции тока. На третьем этапе [182–184] использовалась модифицированная консервативная схема для расчета поля температуры [185]. Это дало возможность повысить точность при больших числах Рэлея.

Наличие довольно большого количества определяющих параметров, в том числе фактора времени, порождает большое разнообразие возможных режимов конвекции. Прежде всего, с точки зрения температурного расслоения принципиальное значение имеет соотношение гепловых потоков, подводимых к свободной и боковой поверхностям, т. е. безразмерный тепловой поток $q_{\text{пов}}$. При малых значениях $q_{\text{пов}}$ основной вклад в температурное расслоение вносит конвекция, а при большой величине $q_{\text{пов}}$ температурное расслоение определяется уже тепловым потоком, подводимым к жидкости сверху, и практически не зависит от интенсивности и структуры конвективного течения. Что касается теплового потока, подводимого снизу, то он существенно меньше влияет на вертикальное распределение температуры. Такое различие связано с тем, что нагрев сверху приводит к устойчивой, а нагрев снизу — к неустойчивой стратификации.

В первом случае конвекция подавляется и течение как бы подстраивается под заданное распределение температуры по вертикали. Во втором случае, наоборот, дополнительные конвективные токи, вызванные неустойчивостью и имеющие часто трехмерный характер, интенсивно переносят тепло снизу вверх, сглаживая вертикальные неоднородности поля температуры. Указанные особенности приводят к тому, что при наличии или отсутствии интенсивного подвода тепла сверху реализуются различные режимы прогрева.

Вторым параметром, при изменении которого происходят качественные изменения характеристик конвекции, является безразмерное время. Если продолжительность прогрева достаточно велика, то в сосуде асимптотически устанавливается квазистационарный режим конвекции. В этом режиме течение стационарно, а рост температуры во всех точках объема одинаков и совпадает с ростом среднемассовой температуры:

$$\bar{\theta} = 2Fo + H^{-1}(q_{\text{пов}} + q_d) Fo.$$

При больших числах Рэлея или при интенсивном подводе тепла к днищу, когда течение становится турбулентным, указан-

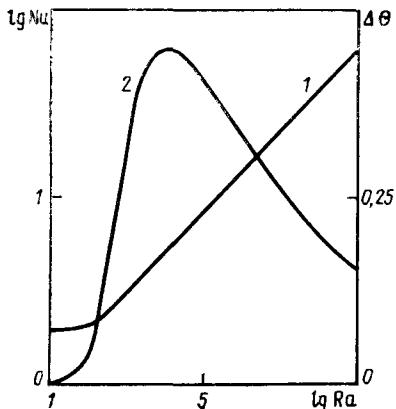


Рис. 3.33. Зависимости числа Нуссельта (1) и перепада температуры вдоль стенки (2) от числа Рэлея на квазистационарном режиме

сительной величиной теплоподвода сверху и безразмерным временем прогрева оказывает не только количественное, но и качественное влияние на конвекцию. В зависимости от числа Рэлея можно выделить режимы слабой ($Ra < 10^4$) и интенсивной ($Ra > 10^4$) конвекции. При интенсивной конвекции имеются четко выраженные пограничный слой на боковой стенке и центральное ядро, в котором температура и вертикальная составляющая скорости практически постоянны по горизонтали. В режиме слабой конвекции скорости и размеры восходящего и нисходящего течений соизмеримы, причем влияние течения на распределение температуры по горизонтали сравнительно невелико.

Помимо структурных различий, в режимах слабой и интенсивной конвекции имеются и различия в характере зависимостей некоторых величин от числа Рэлея. На рис. 3.33 для большого времени прогрева при боковом подводе тепла показаны зависимости числа Нуссельта и перепада температуры вдоль боковой стенки от числа Рэлея ($Nu = \frac{hL}{\kappa(\theta_{ct} - \theta_0)}$, где θ_{ct} , θ_0 — температуры на боковой стенке и оси симметрии). Видно, что в режиме слабой конвекции вертикальный перепад температуры увеличивается, а при интенсивной конвекции уменьшается с ростом числа Рэлея. На границе указанных режимов конвекция создает максимальное вертикальное температурное расслоение. Этот важный для многих приложений факт был впервые получен в работе [139].

Число Нуссельта монотонно увеличивается с ростом числа Рэлея, но в режиме интенсивной конвекции это увеличение происходит по степенному закону. Зависимости других характеристи-

ные особенности квазистационарного режима имеют место только для средних по времени величин тогда как мгновенные значения скорости и температуры пульсируют во времени.

До выхода на квазистационарный режим в сосуде последовательно реализуются различные нестационарные режимы конвекции. В каждом из нестационарных режимов пространственно-временная структура конвекции имеет свои особенности, подробно рассмотренные в п. 3.3.4.

Основным параметром, характеризующим интенсивность конвекции, является число Рэлея. Однако при конвекции в вертикальном цилиндрическом сосуде величина числа Рэлея наряду с отно-

стик от числа Рэлея в режиме интенсивной конвекции также имеют степенной вид, что типично для течений с пограничным слоем. Необходимо отметить, что на рис. 3.33 для чисел Рэлея $Ra \leq 10^5$ использованы результаты [139], а при больших числах Рэлея — данные [183], поскольку результаты [139] при больших числах Рэлея соответствуют сравнительно небольшим временам прогрева.

В режимах слабой и интенсивной конвекции прогрев жидкости происходит за счет различных механизмов. При слабой конвекции определяющую роль играет кондуктивный перенос тепла по горизонтали. В режиме интенсивной конвекции центральная часть сосуда прогревается за счет вертикального конвективного переноса тепла от свободной поверхности, куда поступает прогретая жидкость из пограничного слоя.

3.3.3. Квазистационарный режим конвекции

Боковой подвод тепла. Известно, что при подводе тепла сбоку механическое равновесие невозможно [41]. Поэтому конвекция, обусловленная боковым подводом тепла, чрезвычайно широко распространена в природе и технике. Для практических приложений наибольший интерес представляет режим интенсивной конвекции ($Ra > 10^4$). Ниже приведены результаты параметрических исследований, в которых число Рэлея варьировалось от 10^6 до 10^9 , число Прандтля — от 1 до 7 и степень заполнения — от 1 до 4.

На рис. 3.34 показаны типичные для режима интенсивной конвекции картины линий тока и изотерм. Восходящий поток занимает сравнительно узкую область около боковой стенки.

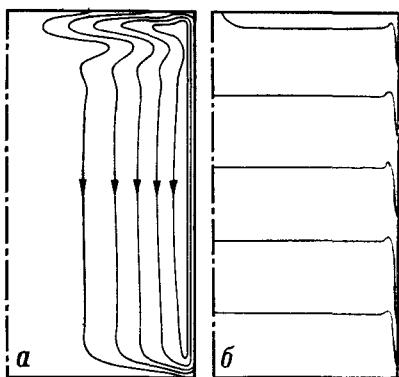


Рис. 3.34. Линии тока (а) и изотермы (б) при $Ra = 10^9$, $Pr = 1$, $H = 2$

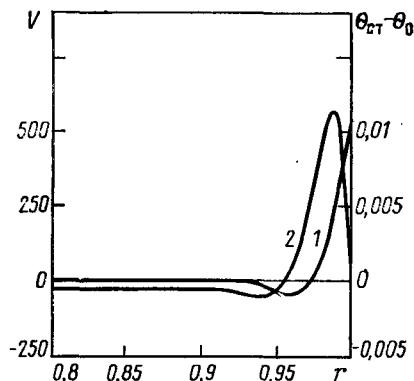


Рис. 3.35. Горизонтальные профили температуры (1) и вертикальной составляющей скорости (2)

θ_0 — температура на оси симметрии; $Ra = 10^9$, $Pr = 1$, $H = 2$

Основную часть объема жидкости занимает центральное ядро, течение в котором гораздо менее интенсивно, чем течение около стенки. Температура в ядре мало меняется по горизонтали и почти линейно растет по высоте. Около стенки имеется большой горизонтальный градиент температуры, а вертикальный градиент приблизительно такой же, как в ядре.

Вблизи свободной поверхности и днища течение является довольно сложным, однако в центральной по высоте части сосуда течение близко к плоскопараллельному. В этой области скорости очень мало меняются по вертикали, что подтверждается прямыми измерениями [229]. Проведенные расчеты показали, что изменение степени заполнения H не приводит к заметным изменениям течения около свободной поверхности и днища. При этом меняется только вертикальная протяженность зоны плоскопараллельного течения без изменения величины скорости и вертикального градиента температуры. Поэтому степень заполнения H практически не влияет на характеристики течения и теплоотдачу от боковой стенки. Вместе с тем, так как градиент температуры по вертикали меняется очень слабо, вертикальный перепад температуры приблизительно линейно зависит от H .

Параметрическое исследование в указанном выше диапазоне критерии подобия показало, что и число Прандтля слабо влияет на характеристики конвекции. Отметим, что при выбранных масштабах безразмерных величин число Прандтля является множителем перед конвективными членами в уравнении переноса вихря. Однако в условиях почти плоскопараллельного течения около стенки эти конвективные члены малы. Наличие устойчивой стратификации также уменьшает относительную величину конвективных членов, так как уменьшается вертикальная составляющая скорости. Все это приводит к тому, что при квазистационарной конвекции в сосуде число Прандтля гораздо меньше влияет на течение и теплообмен, чем при конвекции около вертикальной пластины [68]. Следует отметить, что при ином выборе масштабов безразмерных величин (например, выборе в качестве масштаба скорости V_0 комплекса v/R или v/L) или при использовании в качестве определяющего критерия подобия числа Грасгофа вместо числа Рэлея влияние числа Прандтля может оказаться существенным [149].

Рассмотрим теперь более подробно особенности конвекции в различных характерных зонах. На рис. 3.35 показаны профили температуры и вертикальной составляющей скорости в центральном горизонтальном сечении. Отчетливо различаются динамический и тепловой пограничные слои на боковой стенке и центральное ядро, в котором вертикальная составляющая скорости и температура практически постоянны по горизонтали. Форма профилей вблизи стенки почти такая же, как при конвекции около пластины с заданным потоком тепла [68]. Однако в отличие от конвекции около пластины профили скорости и температуры имеют локальные минимумы на внешней границе

пограничного слоя, причем минимум температуры располагается приблизительно там, где скорость обращается в нуль. Эта особенность наблюдалась и в экспериментах [229] и связана, видимо, с наличием температурной стратификации в ядре. В условиях стратификации сравнительно холодные частицы жидкости на внешней границе пограничного слоя, движущиеся достаточно далеко от горячей стенки, не успевают существенно нагреться за время подъема и, попадая в верхнюю часть сосуда с повышенной температурой, начинают тонуть, образуя встречное течение между ядром и пограничным слоем.

Обозначим через δ расстояние от стенки до точки максимума скорости. Полученные в расчетах значения максимальной скорости и параметра δ можно аппроксимировать формулами

$$V_{\max} = 0,28 \text{ Ra}^{0,37}, \quad \delta = 0,91 \text{ Ra}^{-0,21}.$$

Как отмечалось выше, характеристики пограничного слоя мало меняются по высоте стенки. Что касается формы профилей скорости и температуры, то она мало меняется и при изменении числа Рэлея. В частности, при числах Рэлея от 10^6 до 10^9 расстояние от стенки до точки, в которой реализуется локальный минимум температуры и нулевая величина скорости, приблизительно в 3,3 раза превышает расстояние δ .

На рис. 3.36 приведены вертикальные профили составляющих скорости в ядре. Видно, что в верхней части сосуда течение имеет довольно сложную слоистую структуру, которой соответствует характерная «змеевидная» форма линий тока (см. рис. 3.34). Механизм этого явления состоит в следующем. Прогреваясь в пограничном слое, жидкость вслывает вдоль стенки к свободной поверхности, где происходит разворот потока. Силы плавучести препятствуют перемешиванию этой прогретой жидкости с более холодной жидкостью в ядре, поэтому прогретая жидкость не растекается сразу по всему объему ядра, а движется горизонтально к оси симметрии в виде узкой струи. Средняя толщина этой струи близка к толщине пограничного слоя, а максимальная скорость в ней соизмерима с максимальной скоростью в пограничном слое.

Около оси симметрии вновь происходит разворот потока, а, поскольку жидкость все еще сравнительно теплая, силы плавучести вновь препятствуют внедрению этой жидкости по вертикали в ядро. В результате после разворота около оси симметрии жидкость вновь движется в горизонтальном направлении, но уже под течением на поверхности и в противоположном направлении. Таким образом, частицы жидкости по мере охлаждения и продвижения в нижнюю часть сосуда совершают несколько колебаний в горизонтальном направлении. Постепенно эти колебания затухают, и в нижней части сосуда жидкость перемещается уже практически вертикально.

Образование слоистых структур является одной из характерных особенностей стратифицированных конвективных течений

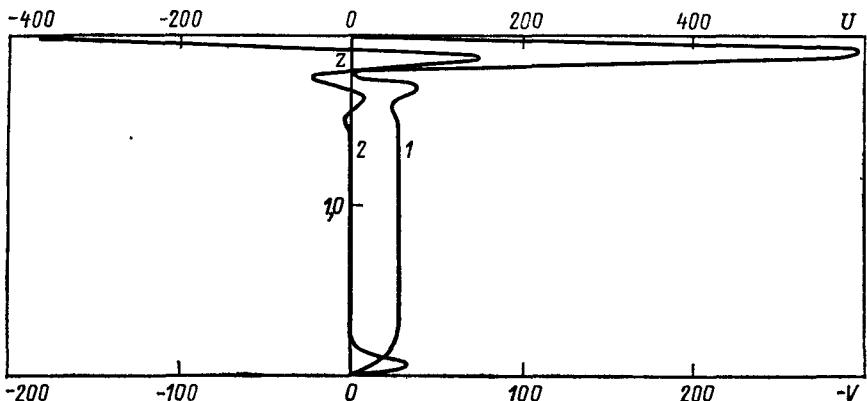


Рис. 3.36. Профили вдоль оси z вертикальной составляющей скорости на оси симметрии (1) и горизонтальной составляющей скорости на расстоянии $r=0,5$ от оси (2) при $\text{Ra}=10^9$, $\text{Pr}=1$, $H=2$

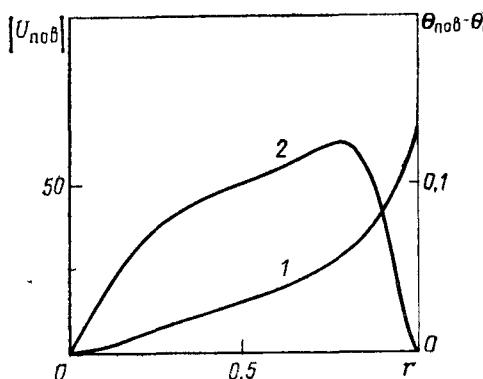
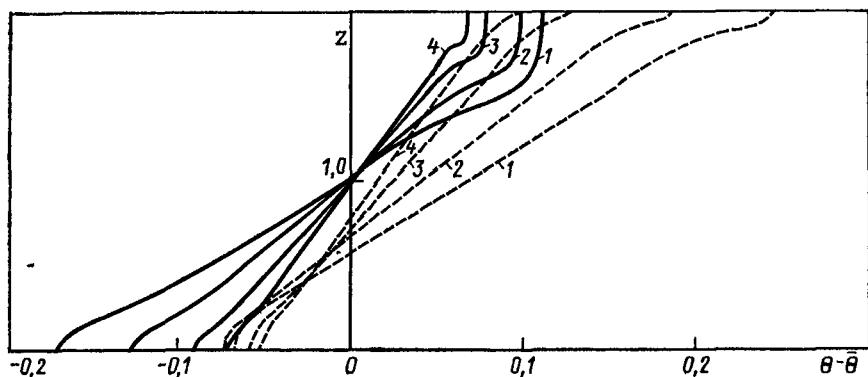


Рис. 3.37. Вертикальные профили температуры на оси симметрии (сплошные линии) и стенке (штриховые линии)

$\text{Pr}=1$,
 $H=2$;
 1 — $\text{Ra}=10^6$,
 2 — 10^7 ,
 3 — 10^8 ,
 4 — 10^9

Рис. 3.38. Распределения температуры (1) и скорости (2) на свободной поверхности при $\text{Ra}=10^6$, $\text{Pr}=1$, $H=2$

при больших числах Рэлея и подробно изучается в гл. 5 для случая бинарной смеси.

В средней по высоте части ядра, ниже зоны слоистого течения, имеется область, в которой вертикальная составляющая скорости постоянна по вертикали, что указывает на отсутствие обмена массой между ядром и пограничным слоем. Расходы жидкости в восходящем и нисходящем течениях в этой части сосуда близки к максимальному значению расхода $2\pi|\psi|_{\max}$, где $|\psi|_{\max}$ — максимальная по объему величина функции тока, которая согласно результатам расчетов зависит от числа Рэлея по формуле

$$|\psi|_{\max} = 0,7 Ra^{0,14}.$$

Используя уравнение расхода и пренебрегая малой толщиной пограничного слоя, можно выразить скорость в средней части ядра через максимальную функцию тока

$$V_0 = -2|\psi|_{\max}.$$

Вблизи днища сосуда имеется довольно интенсивное радиальное течение, которое является основным источником жидкости, поступающей в пограничный слой. С ростом числа Рэлея вертикальный размер этого течения, как и слоистого течения около свободной поверхности, уменьшается.

В отличие от поля течения поле температуры имеет более простую структуру. На рис. 3.37 для различных чисел Рэлея показаны профили температуры на оси симметрии и стенке. За исключением узких зон около днища и свободной поверхности, профили близки к линейным, причем перепад температуры между стенкой и осью почти не меняется по высоте. Поэтому введенное в п. 3.3.2 среднее число Нуссельта является по существу и локальным. Поскольку в ядре температура постоянна по горизонтали, число Нуссельта характеризует перепад температуры не только между стенкой и осью, но и в пограничном слое. Рассчитанные значения числа Нуссельта хорошо обобщаются формулой

$$Nu = 0,66 Ra^{0,22}.$$

В верхней части сосуда на оси симметрии имеется довольно протяженный участок, где температура почти постоянна. Именно на этом участке происходит разворот поверхности струи, что и является причиной выравнивания температуры. Вертикальный профиль средней по горизонтали температуры не содержит данной особенности ввиду того, что протяженность области разворота струи мала. С ростом числа Рэлея толщина струи уменьшается и соответственно уменьшается изотермический участок на оси симметрии.

Количественной характеристикой температурного расслоения является разность между средней температурой на свободной поверхности и среднемассовой температурой жидкости. По-

лученные в расчетах значения этой величины аппроксимируются формулой

$$\Delta\theta_{\text{нов}} = 0,33 H Ra^{-0,1}.$$

Поскольку среднемассовая температура реализуется приблизительно в центре сосуда, из приведенной формулы следует, что вертикальный градиент температуры не зависит от степени заполнения H .

На рис. 3.38 показаны распределения скорости и температуры на свободной поверхности. В отличие от остального объема около свободной поверхности имеется интенсивное радиальное течение. Свободную поверхность можно разделить на центральную и периферийную области, граница между которыми определяется положением максимума абсолютной величины скорости. Отметим, что расстояние от стенки до этого максимума приблизительно в 4,5 раза превышает δ — расстояние от стенки до максимума скорости в пограничном слое. В периферийной части свободной поверхности скорость возрастает по мере удаления от стенки, что связано с разворотом течения и формированием поверхностной струи: Распределение температуры здесь существенно нелинейно. В центральной части свободной поверхности температура линейно меняется по радиусу, а скорость уменьшается по мере приближения к оси симметрии.

Полученные в расчетах значения средней и максимальной скоростей на поверхности описываются формулами

$$|U_{\text{пов}}| = 0,63 Ra^{0,31}, \quad |U_{\text{пов}}|_{\text{max}} = 0,6 Ra^{0,33}.$$

С увеличением числа Рэлея перепад температуры в центральной части свободной поверхности уменьшается быстрее суммарного перепада температуры. Поэтому при больших числах Рэлея почти весь перепад температуры вдоль поверхности реализуется в окрестности стенки.

Подвод тепла к боковой и свободной поверхностям. Подвод тепла к свободной поверхности жидкости приводит к увеличению стратификации (температурного расслоения). При боковом теплоподводе также имеется стратификация, обусловленная конвекцией, однако при дополнительном нагреве сверху стратификация даже при умеренных значениях теплового потока $q_{\text{пов}}$ сильно возрастает. На рис. 3.39 для $q_{\text{пов}}=1$ показаны распределения температуры на оси симметрии и стенке при наличии и отсутствии конвекции. Видно, что изменение температуры по вертикали в обоих случаях практически одинаково. Вместе с тем конвекция оказывает очень сильное влияние на горизонтальный перепад температуры. Если при кондуктивном прогреве неоднородности поля температуры по горизонтали и вертикали одного порядка, то при наличии конвекции горизонтальные разности температуры существенно меньше вертикальных. Таким образом, при $q_{\text{пов}} \geq 1$ влияние конвекции на поле температур «анизотропно». Конвекция слабо влияет на вертикальное

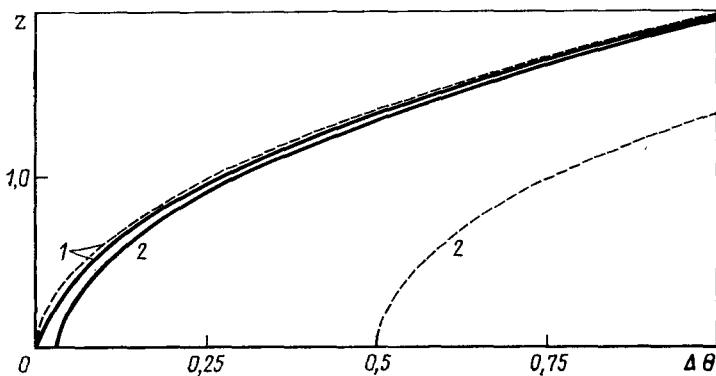


Рис. 3.39. Профили избыточной температуры (относительно температуры в точке $r=z=0$) на оси симметрии (1) и стенке (2) при $\text{Ra}=10^8$, $\text{Pr}=1$, $H=2$, $q_{\text{пов}}=1$

Штриховые линии — те же профили при отсутствии конвекции

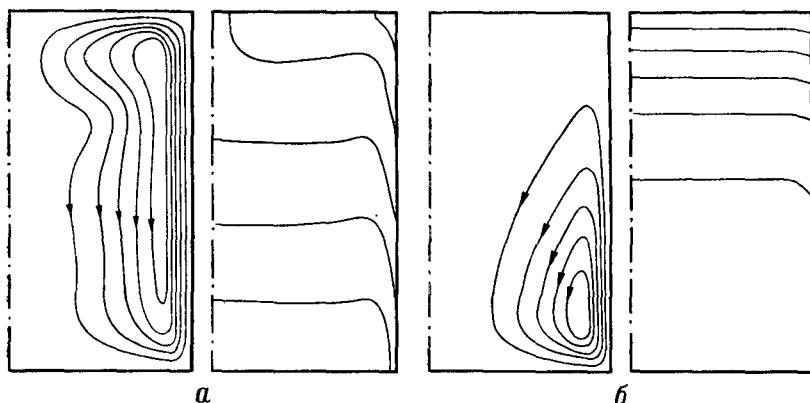


Рис. 3.40. Линии тока (слева) и изотермы (справа) при боковом (а) и комбинированном (б) подводах тепла при $\text{Ra}=10^6$, $\text{Pr}=1$, $H=2$

а — $q_{\text{пов}} = 0$; б — $q_{\text{пов}} = 3$

распределение температуры, но значительно уменьшает горизонтальный перепад.

На рис. 3.40 показаны линии тока и изотермы при боковом теплоподводе и при интенсивном нагреве сверху. Как и при боковом подводе тепла, можно выделить центральное ядро, в котором температура и вертикальная составляющая скорости почти постоянны по горизонтали. Однако вертикальный профиль температуры уже не является линейным, а скорость в центральной части ядра не постоянна по высоте. Наличие сильной устойчивой стратификации, которая увеличивается с высотой, затрудняет проникновение жидкости из нижней части сосуда в верх-

нюю. Поэтому конвективное течение интенсивно только вблизи днища, где стратификация мала, а по мере приближения к свободной поверхности течение ослабевает, что хорошо прослеживается по расположению линий тока и изотерм на рис. 3.40.

Максимальный расход жидкости через пограничный слой также реализуется в нижней части сосуда. Далее, поднимаясь вдоль подогреваемой боковой стенки, жидкость одновременно оттекает в центральную часть сосуда. Поэтому расход через пограничный слой заметно уменьшается с высотой в отличие от случая бокового подвода тепла. Отток жидкости от боковой стенки в ядро приводит, несмотря на ослабление течения, к увеличению числа Нуссельта, причем этот эффект усиливается с ростом теплового потока $q_{\text{пов}}$.

Для анализа и обобщения характеристик конвекции при комбинированном теплоподводе удобно их представлять в виде отношения к соответствующим характеристикам при боковом подводе тепла. Такие относительные величины будем обозначать штрихом. В частности, относительные значения числа Нуссельта обобщаются формулой

$$Nu' = 1 + 0,09 Ra^{0,08} q_{\text{пов}}^{0,85}.$$

Отметим, что и при комбинированном подводе тепла число Прандтля не оказывает заметного влияния на теплоотдачу, а степень заполнения сосуда влияет в основном на вертикальное температурное расслоение (в том же диапазоне критериев подобия, что и в п. 3.3.1). Слабое влияние числа Прандтля на теплоотдачу связано, видимо, с общим уменьшением интенсивности конвекции при нагреве сверху. При увеличении $q_{\text{пов}}$ от 0 до 1 число Нуссельта возрастает на несколько десятков процентов, тогда как характерные скорости уменьшаются в несколько раз, т. е. уменьшение скоростей — более сильный эффект, чем увеличение теплоотдачи. Относительные значения средней и максимальной скоростей на свободной поверхности обобщаются формулами

$$|U_{\text{пов}}'| = (1 + 0,76 Ra^{0,1} q_{\text{пов}})^{-1},$$

$$|U_{\text{пов}}|_{\max}' = (1 + 0,53 Ra^{0,1} q_{\text{пов}})^{-1}.$$

Отметим, что с ростом $q_{\text{пов}}$ средняя скорость на свободной поверхности уменьшается несколько быстрее, чем максимальная. Этот факт отражает изменение формы профиля скорости на поверхности. При малых значениях $q_{\text{пов}}$ профиль является более наполненным, однако в целом изменение формы профиля скорости незначительно. Что касается профиля температуры на свободной поверхности, то подвод тепла сверху приводит к заметному уменьшению градиента температуры вдали от стенки.

Обозначим через $\phi(z)$ разность между средней по горизонтали температурой жидкости и среднемассовой температурой. На рис. 3.41 для различных значений теплового потока $q_{\text{пов}}$ при-

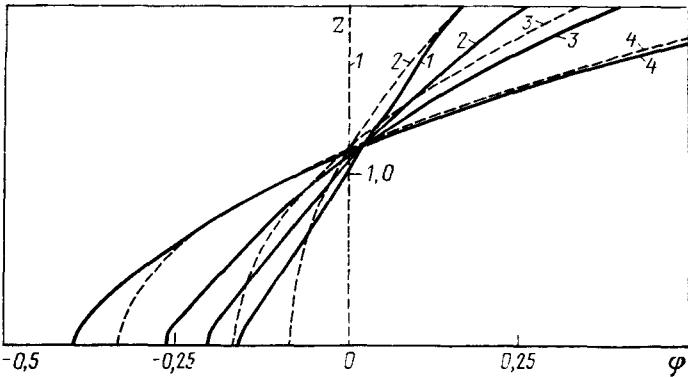


Рис. 3.41. Вертикальные профили избыточной температуры ϕ при $Ra=10^6$, $Pr=1$, $H=2$

Штриховые линии — те же профили при отсутствии конвекции; 1 — $q_{\text{пов}}=0$, 2 — 0,25, 3 — 0,5, 4 — 1

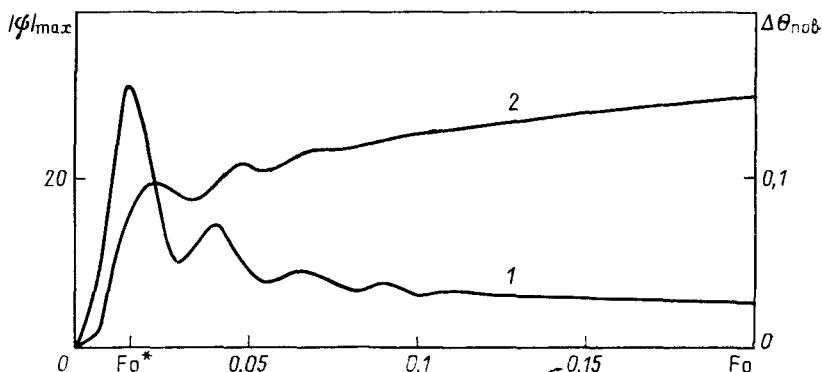


Рис. 3.42. Изменение во времени максимальной функции тока (1) и температурного расслоения (2) при $Ra=10^6$, $Pr=1$, $H=2$

ведены вертикальные профили избыточной температуры ϕ при наличии и отсутствии конвекции. Видно, что с увеличением $q_{\text{пов}}$ влияние конвекции на распределение температуры по вертикали в целом уменьшается, что связано с общим ослаблением конвективного течения. При $q_{\text{пов}}=1$ влияние конвекции оказывается только около днища: Поэтому при интенсивном подводе тепла сверху температурное расслоение является таким же, как при кондуктивном прогреве. При достаточно малых значениях $q_{\text{пов}}$ ситуация становится обратной. В этом случае температурное расслоение определяется только конвекцией и не зависит от теплового потока, подводимого к свободной поверхности. Ясно, что существует некоторый промежуточный диапазон теплового потока $q_{\text{пов}}$, в котором существенный вклад в температурное расслоение вносят оба указанных выше фактора.

Следуя работе [132], среднюю температуру свободной поверхности для этого диапазона удобно представить в виде суммы

$$\bar{\theta}_{\text{пов}} = \bar{\theta} + \frac{1}{3} H q_{\text{пов}} + \Delta \theta_{\text{пов}}.$$

Здесь $\bar{\theta}$ — среднемассовая температура жидкости; второе слагаемое соответствует решению задачи о кондуктивном прогреве; $\Delta \theta_{\text{пов}}$ — некоторая конвективная добавка к температурному расслоению. Во всех проведенных расчетах были получены только положительные значения конвективной добавки. С увеличением $q_{\text{пов}}$ конвективная добавка стремится к нулю, а при уменьшении $q_{\text{пов}}$ — к величине температурного расслоения при боковом подводе тепла. Относительные значения конвективной добавки аппроксимируются формулой

$$\Delta \theta'_{\text{пов}} = (1 + 0,14 Ra^{0,25} q_{\text{пов}}^{1,3})^{-1}.$$

Используя полученные результаты, можно вычислить тепловой поток $q^*_{\text{пов}}$, при котором конвективная добавка к температурному расслоению равна кондуктивной составляющей. Этот тепловой поток приближенно описывается формулой

$$q^*_{\text{пов}} = 1,2 Ra^{-0,14}.$$

При $q_{\text{пов}} < q^*_{\text{пов}}$ основной вклад в температурное расслоение вносит конвекция, а при $q_{\text{пов}} > q^*_{\text{пов}}$ — перенос тепла теплопроводностью.

Структура приведенных выше обобщающих критериальных зависимостей указывает, что при одном и том же тепловом потоке $q_{\text{пов}}$ отличие характеристик конвекции от значений этих же характеристик при боковом подводе тепла увеличивается с ростом числа Рэлея. Это означает, что с увеличением числа Рэлея конвекция становится более интенсивной и одновременно более чувствительной к тепловому потоку, подводимому к свободной поверхности.

3.3.4. Нестационарные режимы ламинарной конвекции

Как отмечалось выше, при достаточно большом времени прогрева устанавливается квазистационарный режим конвекции. Сам же процесс установления представляет собой последовательную смену нескольких существенно нестационарных режимов, каждый из которых имеет свои характерные особенности. Поскольку с точки зрения классификации нестационарных режимов подвод тепла к свободной поверхности не имеет принципиального значения, будем рассматривать только случай бокового подвода тепла. Вместе с тем следует отметить, что в условиях слабой и интенсивной конвекции процессы течения и теплообмена развиваются по-разному.

Рассмотрим сначала случай интенсивной конвекции ($Ra > 10^4$). На рис. 3.42 показано изменение во времени максимальной функции тока и температурного расслоения. По виду этих зависимостей прослеживаются три различных нестационарных режима: развитие конвекции, конвективные колебания и переходный режим. На начальной стадии — режиме развития конвекции — происходит нестационарный прогрев жидкости около стенки и формирование пограничного слоя. Поскольку пограничный слой не успевает стать стационарным по всей высоте стенки, в режиме развития конвекции интенсивность течения монотонно увеличивается, что проявляется, в частности, в увеличении максимальной функции тока.

Погреваясь в пограничном слое, жидкость поднимается вдоль стенки к свободной поверхности, разворачивается и движется далее вдоль поверхности к оси симметрии, не смешиваясь с непрогретой жидкостью в центральной части сосуда (рис. 3.43, а). При этом свободная поверхность заполняется прогретой жидкостью, что приводит к быстрому увеличению средней температуры поверхности. В режиме развития конвекции температура поверхности значительно превышает среднемассовую температуру, так как поступающее в жидкость тепло идет только на прогрев тонких слоев вдоль стенки и свободной поверхности.

Режим развития конвекции заканчивается в момент времени Fo^* , когда струя прогретой жидкости достигает оси симметрии. Начиная с этого момента времени максимальное значение функции тока, характеризующее интенсивность течения, уменьшается. На фоне общего ослабления конвекции имеют место колебания, механизм которых состоит в следующем. После достижения оси симметрии прогретая жидкость начинает опускаться вдоль оси вниз (см. рис. 3.43, б—г). Если при движении струи вдоль свободной поверхности подъемная сила была направлена перпендикулярно скорости, то по мере продвижения жидкости вдоль оси эта сила начинает препятствовать движению. В результате прогретая жидкость сначала замедляет свое продвижение вниз, а затем всплывает к свободной поверхности, образуя возвратное течение, которое тормозит течение на поверхности (см. рис. 3.47, б—г). По мере всплыивания прогретой жидкости возвратное течение ослабевает, что вызывает увеличение потока прогретой жидкости вдоль свободной поверхности к оси. Прогретая жидкость вновь начинает опускаться вниз вдоль оси симметрии, и колебания в поле течения повторяются.

Причиной возникновения конвективных колебаний является неравномерность прогрева жидкости по горизонтали, возникающая при опускании прогретой жидкости вдоль оси симметрии. Возвратные течения переносят к оси холодную жидкость из пространства между стенкой и осью, а на ее место поступает прогретая жидкость со стороны свободной поверхности. В итоге горизонтальные неоднородности температурного поля в центральной части сосуда уменьшаются и колебания со временем

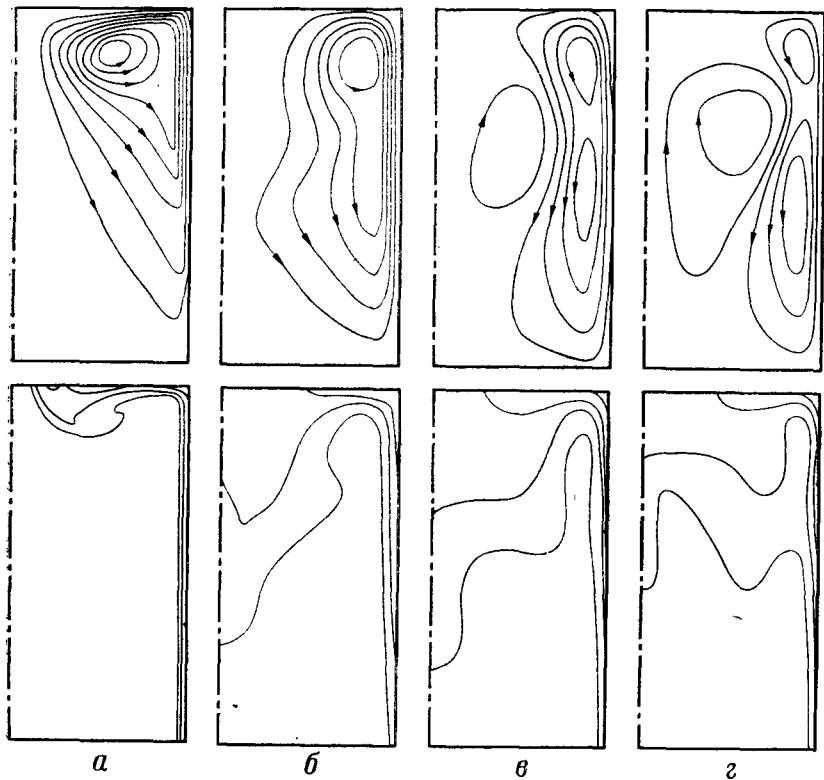


Рис. 3.43. Линии тока (вверху) и изотермы (внизу) в начале развития конвекции (а) и в режиме конвективных колебаний (б—г)

а — $\text{Ra} = 10^{10}$, $\text{Pr} = 1$, $H = 2$, $\text{Fo} = 5 \cdot 10^{-4}$; б — г — $\text{Ra} = 7 \cdot 10^6$, $\text{Pr} = 1$, $H = 2$ ($\text{Fo} = 1,1 \cdot 10^{-2}$ (б), $1,3 \cdot 10^{-2}$ (г) и $1,5 \cdot 10^{-2}$ (з))

затухают. После окончания режима конвективных колебаний в центральной части сосуда имеется сформировавшееся ядро, в котором температура практически постоянна по горизонтали.

Режим конвективных колебаний сменяется переходным режимом, в котором пространственная структура течения и поля температуры такая же, как при квазистационарной конвекции. Однако в отличие от квазистационарного режима в переходном режиме скорости и пространственные разности температуры монотонно изменяются во времени, асимптотически приближаясь к квазистационарным значениям. При этом скорости и горизонтальный перепад температуры уменьшаются, а температурное расслоение растет.

Рассмотрим теперь вопрос о продолжительности нестационарных режимов. На рис. 3.44 показана зависимость нормированной величины температурного расслоения от безразмерного времени в переходном режиме. В качестве безразмерного време-

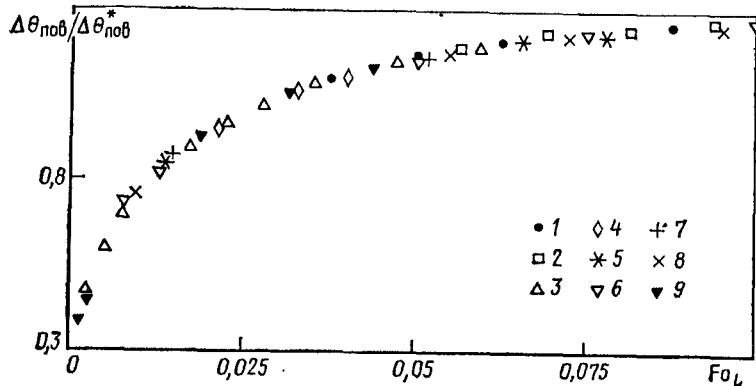


Рис. 3.44. Зависимость температурного расслоения от времени в переходном режиме

$\Delta\theta_{\text{пов}}^*$ — значение $\Delta\theta_{\text{пов}}$ при $Fo_L = 0,025$. Значения Ra , Pr , H для точек 1—9 приведены ниже:

N	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Ra	10^6	10^7	10^8	10^9	$1,2 \cdot 10^7$	$1,2 \cdot 10^7$	$1,4 \cdot 10^8$	$2 \cdot 10^7$	$1,2 \cdot 10^7$
Pr	1	1	1	1	4	4	7	2	1
H	2	2	2	2	2	1	2	2	4

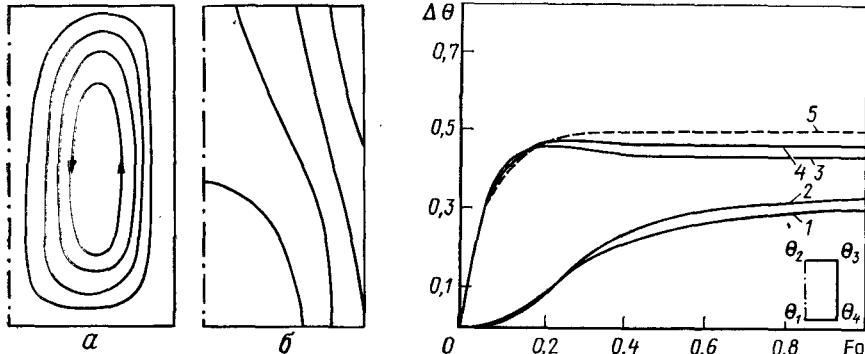


Рис. 3.45. Линии тока (а) и изотермы (б) в переходном режиме при слабой конвекции при $Ra=10^3$, $Pr=1$, $H=2$, $Fo=0,5$

Рис. 3.46. Изменение во времени характерных разностей температуры при слабой конвекции

1 — $\theta_2 - \theta_1$, 2 — $\theta_3 - \theta_4$, 3 — $\theta_4 - \theta_1$, 4 — $\theta_3 - \theta_2$, 5 — разность температур между стенкой и осью симметрии при кондуктивном прогреве

ни использовано число Фурье $Fo_L = at/L^2$, определенное через высоту столба жидкости, а температурное расслоение нормировано на температурное расслоение в момент времени $Fo_L = 0,025$. Как видно, зависимость нормированной величины температурного расслоения от числа Фурье Fo_L для переходного режима конвекции близка к универсальной. Из этого, в частности, следует, что время установления квазистационарного режима не зависит от числа Рэлея. Кроме того, само время установления ($Fo_L \approx 0,1$) близко ко времени установления квазистационарного режима при кондуктивном прогреве жидкости по вертикали. Отметим, что при наличии интенсивного подвода тепла к свободной поверхности конвекция оказывает слабое влияние на температурное расслоение (конвективная добавка мала). Приведенные на рис. 3.44 результаты показывают, что времена установления квазистационарного режима при наличии и отсутствии нагрева сверху, а также при кондуктивном прогреве близки между собой, хотя механизмы образования температурного расслоения принципиально различны.

Вопрос о длительности режимов развития конвекции и конвективных колебаний более сложен, так как на продолжительность этих режимов существенное влияние оказывают практически все критерии подобия. Для оценки времени окончания режима развития конвекции можно рекомендовать формулу

$$Fo^* = 1,6 Ra^{-0.33}.$$

Продолжительность режима конвективных колебаний, видимо, также сокращается с ростом числа Рэлея, однако обобщить время окончания этого режима весьма сложно как из-за влияния различных параметров, так и из-за асимптотического характера процесса затухания колебаний.

При слабой конвекции по характеру эволюции течения также можно выделить режим развития конвекции, в котором интенсивность течения возрастает, и переходный режим, в котором интенсивность течения монотонно уменьшается, асимптотически приближаясь к стационарному значению. Однако в целом скорости конвективного течения малы и колебания не возбуждаются, т. е. режим конвективных колебаний не реализуется. На рис. 3.45 показаны линии тока и изотермы в конце переходного режима, откуда видно, что пограничный слой и изотермическое по горизонтали ядро отсутствуют.

Характерной особенностью слабой конвекции является то обстоятельство, что длительность режима, при котором конвекция начинает влиять на теплообмен, по порядку величины соответствует длительности режима развития конвекции. На рис. 3.46 показано изменение во времени характерных разностей температуры, откуда видно, что конвекция вначале оказывает влияние на вертикальные разности температуры (которые при отсутствии конвекции равны нулю) и только потом — на горизонтальные. Время установления квазистационарного режима в не-

сколько раз превосходит время установления этого режима при кондуктивном прогреве. Это означает, что слабая конвекция затягивает установление. В основном это проявляется в медленном изменении вертикальных разностей температуры, тогда как соответствующие горизонтальные разности устанавливаются довольно быстро.

3.3.5. Переходные и турбулентные режимы конвекции в сосуде

Благодаря разработке эффективных вычислительных алгоритмов [27, 149, 185] стало возможным проводить численное моделирование конвекции в цилиндрическом сосуде при числах Рэлея 10^{10} и выше. Представленные ниже результаты получены для случая бокового подвода тепла при фиксированных значениях числа Прандтля ($\text{Pr}=1$) и степени заполнения ($H=2$) и двух значениях числа Рэлея: 10^{10} и 10^{12} . Если ввести также число Рэлея Ra_L , определенное не через радиус сосуда, а через высоту столба жидкости, то расчетные значения числа Рэлея Ra_L составят соответственно $1,6 \cdot 10^{11}$ и $1,6 \cdot 10^{13}$. Для плоской вертикальной пластины с постоянным тепловым потоком эти числа Рэлея приблизительно соответствуют переходному и турбулентному режимам [34, 258].

Характерной особенностью конвекции в сосудах при больших числах Рэлея является развитие неустойчивости пограничного слоя. Неустойчивость появляется при малом времени прогрева, когда струя прогретой жидкости еще не достигла оси симметрии, т. е. в режиме развития конвекции. В нижней части сосуда в пограничном слое образуются волны, амплитуда которых нарастает вниз по потоку. Отметим, что неустойчивость развивается на фоне общего роста скоростей. С некоторого момента времени в верхней части пристеночной области появляются выбросы горячей жидкости из пограничного слоя, сопровождающиеся притоком в пограничный слой холодной жидкости из центральной части сосуда. В результате на внешней границе пограничного слоя образуются вихри сравнительно небольшого размера. Динамика образования выбросов при числе Рэлея $\text{Ra}_L = 1,6 \cdot 10^{11}$ показана на рис. 3.47, *a—e*. При увеличении числа Рэлея неустойчивость пограничного слоя развивается аналогично, но уменьшается характерный масштаб вихрей и граница начала неустойчивости смещается к днищу (рис. 3.47, *g*).

Показанная на рис. 3.47 структура течения и поля температуры имеет кратковременный характер. При увеличении времени прогрева, когда в центральном ядре появляется температурная стратификация, структура конвекции усложняется. Тем не менее в поле течения довольно отчетливо выделяются три области: центральное ядро, состоящее из крупномасштабных вихревых образований; тонкий вязкий подслой около стенки, течение в котором близко к плоскопараллельному; мелкомасштабная



Рис. 3.47. Линии тока и изотермы в верхней части пристеночной области ($0,8 \leq r \leq 1$, $1 \leq z \leq 2$) ($\alpha-\delta$) и около боковой стенки ($0,8 \leq r \leq 1$, $0 \leq z \leq 2$) (ε) при малых временах

$\Pr=1$, $H=2$; $\alpha-\delta$ — $\text{Ra}_L = 1,6 \cdot 10^{11}$ ($Fo = 7,7 \cdot 10^{-4}$ (α), $7,9 \cdot 10^{-4}$ (β) и $8,3 \cdot 10^{-4}$ (γ)); ε — $\text{Ra}_L = 1,6 \cdot 10^{13}$, $Fo = 10^{-4}$

вихревая структура на внешней границе пограничного слоя между вязким подслоем и ядром.

Мгновенные структуры течения на внешней границе пограничного слоя в различные моменты времени значительно различаются. В частности, при числе Рэлея $Ra_L = 1,6 \cdot 10^{11}$ наблюдаются два типа течения. В первом случае (рис. 3.48, а) имеется замкнутый контур циркуляции жидкости по периферии ядра, причем вблизи стенки жидкость в ядре движется навстречу течению в вязком подслое. В результате взаимодействия двух встречных потоков на внешней границе пограничного слоя образуется цепочка вихрей с одинаковым направлением вращения. Второй тип течения (рис. 3.48, б) реализуется в том случае, когда течения в вязком подслое и на периферии ядра образуют единый контур циркуляции и интенсивное встречное течение вблизи стенки отсутствует. В этом случае течение в пограничном слое сходно по структуре с турбулентным конвективным течением в вертикальном слое (см. разд. 3.1). Сравнительно мелкие вихри на внешней границе пограничного слоя чередуются с выбросами, характерной особенностью которых является выпуклость линий тока в сторону ядра. При числе Рэлея $Ra_L = 1,6 \cdot 10^{13}$ уменьшаются характерные масштабы вихревых образований и толщина вязкого подслоя, а структура течения является, как правило, комбинацией рассмотренных двух типов, которые реализуются в виде фрагментов в разных частях пограничного слоя (рис. 3.48, в, г).

На рис. 3.49 показано изменение во времени мгновенных значений температуры и обеих составляющих скорости на оси симметрии, в области мелкомасштабной вихревой структуры на внешней границе пограничного слоя и в вязком подслое. Представленные результаты соответствуют числу Рэлея $Ra_L = 1,6 \cdot 10^{13}$ и большому времени прогрева. Видно, что изменения скорости и температуры на оси симметрии сравнительно медленные, что связано с медленными крупномасштабными движениями в ядре. В вязком подслое имеются значительные пульсации температуры и вертикальной составляющей скорости. Пульсации горизонтальной составляющей скорости в вязком подслое малы. Однако с увеличением расстояния от стенки эти пульсации увеличиваются по амплитуде, достигая максимальных значений на внешней границе пограничного слоя. В этой части пограничного слоя пульсации вертикальной составляющей скорости близки по величине к пульсациям в вязком подслое, причем, как правило, пульсации горизонтальной и вертикальной составляющих скорости имеют противоположные знаки. Пульсации температуры на внешней границе пограничного слоя малы и менее регулярны, чем в вязком подслое. В целом особенности пульсаций мгновенных значений аналогичны тем, которые отмечались для вертикального слоя (см. разд. 3.1).

Интересной особенностью конвекций при больших числах Рэлея является ступенчатый характер мгновенного профиля

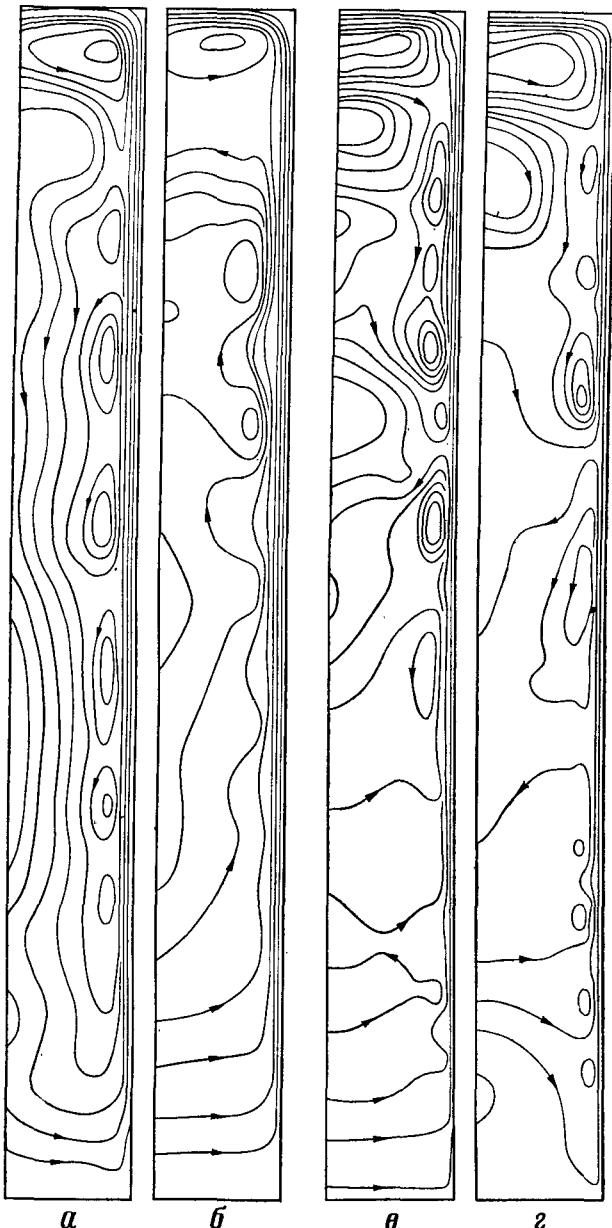


Рис. 3.48. Характерные картины линий тока около стенки ($0,8 \leq r \leq 1$, $0 \leq z \leq 2$) при числе Рэлея $Ra_L = 1,6 \cdot 10^{11}$ (а, б) и $1,6 \cdot 10^{13}$ (γ, ε)
 а — $Fo = 4,6 \cdot 10^{-3}$; б — $5 \cdot 10^{-3}$; γ — $1,5 \cdot 10^{-3}$; ε — $1,65 \cdot 10^{-3}$

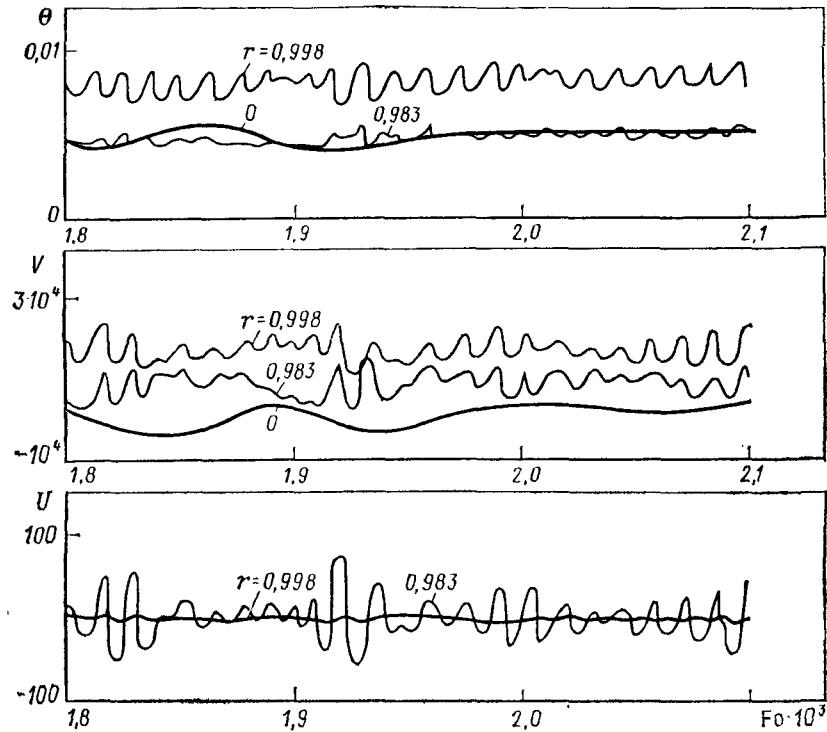
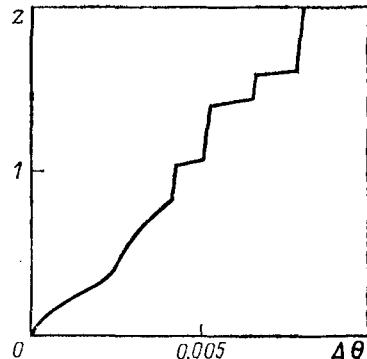


Рис. 3.49. Изменение во времени мгновенных значений температуры θ , вертикальной V и горизонтальной U составляющих скорости в сечении $z=H/2$ при $Ra_L=1,6 \cdot 10^{13}$, $Pr=1$, $H=2$

$r=0$ — ось симметрии,
 $r=0.983$ — область мелкомасштабной вихревой структуры,
 $r=0.998$ — вязкий подслой

Рис. 3.50. Мгновенное распределение температуры на оси симметрии при $Ra_L=1,6 \cdot 10^{13}$



температуры на оси симметрии в верхней части сосуда (рис. 3.50). Видно, что участки с почти постоянной температурой чередуются с узкими зонами большого температурного градиента. С увеличением числа Рэлея количество ступенек увеличивается, а сами ступеньки становятся более отчетливыми. Причиной появления ступенек является, видимо, слоистая структура течения в верхней части ядра (см. п. 3.3.3), при которой течение на оси симметрии представляет собой чередование областей с большими и малыми значениями скорости.

Глава 4

ГИДРОМЕХАНИКА И ТЕПЛОМАССООБМЕН ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ

Кристаллы находят широкое применение в элементной базе ЭВМ, средствах связи, лазерной технике. К их структуре и однородности предъявляются весьма высокие требования. Конвекция, тепло- и массообмен являются теми механизмами, посредством которых условия роста кристалла связаны с его структурой и свойствами. Разнообразие физических свойств кристаллов, обусловленное их назначением, привело к разработке многочисленных методов их получения, различающихся в первую очередь характером питающей среды (газовая или жидкость—расплав, раствор, раствор в расплаве и т. д.). К числу факторов, влияющих на гидродинамику при росте кристаллов, относятся способ подвода тепла, т. е. величина и ориентация потока тепла и фронта кристаллизации по отношению к направлению силы тяжести, геометрия жидкой зоны, способ ее удержания (тигельный, бестигельный методы и т. д.), наличие свободной поверхности, применение различных управляющих воздействий (вращение, магнитное поле). Все эти факторы влияют на конвекцию. Действие конвекции может быть как благоприятным при переносе легирующих примесей, так и неблагоприятным, что приводит к появлению макро- и микронеоднородностей распределения легирующих примесей в кристаллах. Оптимизация процесса выращивания кристаллов требует исследования специализированной математической модели, основанной на уравнениях Навье—Стокса, в которой детально учитываются особенности конкретного метода выращивания кристаллов.

В этой главе систематизированы результаты численных исследований гидромеханики и тепломассообмена, выполнявшихся авторами в последние годы в Институте проблем механики АН СССР. Рассмотрены три основных метода выращивания полупроводниковых структур: вытягивание кристаллов из расплава (метод Чохральского), метод направленной кристаллизации и метод жидкостной эпитаксии¹.

Для метода Чохральского (см. разд. 4.1), который является наиболее распространенным методом промышленного получения

¹ Широкий круг вопросов, относящихся к конструированию алгоритмов и математических моделей различных методов роста кристаллов из жидкой и газовой фаз, представлен в сборнике „Математическое моделирование. Получение кристаллов и полупроводниковых структур“ (Под ред. А А Самарского, Ю П Попова, О С Мажоровой М Наука, 1986 194 с.)

моноокристаллов, на основе численных параметрических исследований установлены закономерности течения расплава в тигле при разных способах подвода тепла к стенкам тигля и скоростях вращения расплава. Найдены параметрические зависимости границы влияния вынужденной и естественной конвекции в расплаве вблизи фронта кристаллизации.

Для метода направленной кристаллизации (см. разд. 4.2) исследованы поперечная неоднородность распределения примеси, эффективный коэффициент распределения, толщина концентрационного пограничного слоя в зависимости от определяющих параметров и найдены границы режимов выращивания кристаллов с однородным в поперечном сечении распределением примеси.

Применительно к методу жидкостной эпитаксии (см. разд. 4.3) исследованы особенности конвекции, определены условия роста эпитаксиальных слоев, соответствующие минимальной неоднородности слоя по толщине, и показана возможность уменьшения этой неоднородности путем изменения толщины слоя раствора—расплава и выбора оптимального угла наклона или вращения.

Важно отметить, что в различных методах роста кристаллов проявляется установленная в гл. 3 фундаментальная закономерность, которая приводит к появлению максимума температурного (концентрационного) расслоения при определенном значении критерия подобия (чисел Рэлея, Марангони), определяющих интенсивность конвекции.

4.1. КОНВЕКЦИЯ, ТЕПЛО- И МАССООБМЕН ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ ВЫТЯГИВАНИЕМ ИЗ РАСПЛАВА (МЕТОД ЧОХРАЛЬСКОГО)

Схема установки для выращивания кристаллов методом Чохральского показана на рис. 4.1. Моноокристалл вытягивается из помещенного в тигель расплавленного материала; для обеспечения осевой симметрии подвода тепла кристалл и тигель могут вращаться с постоянной скоростью в одинаковых или противоположных направлениях [280]. При практической реализации метода Чохральского возможны варианты, например, в выборе системы нагрева или способа вращения кристалла и тигля, связанные с особенностями физических свойств и температурой кристаллизации материала [102, 188].

Качество структуры полученных кристаллов зависит от состава расплавленной массы и процессов тепло- и массообмена в тигле на стадии, предшествующей кристаллизации. Управление процессом на этой стадии основано на исследовании совместного действия естественно-конвективных и вынужденных течений в расплаве. При этом необходимо учитывать характер подвода

тепла к стенкам тигля и его ориентации по отношению к фронту кристаллизации и силе тяжести, вращение кристалла и тигля, а также наличие свободной поверхности расплава. Важной задачей является также исследование механизмов распределения примесей, влияющих на электрофизические, оптические и другие свойства кристаллов.

К настоящему времени выполнены работы по математическому и лабораторному моделированию процессов гидродинамики и тепломассообмена для метода Чохральского [13, 104, 160, 236, 239], в том числе по измерениям теплофизических характеристик на натурных установках [162, 163]. Математическое моделирование на основе решения полных уравнений Навье—Стокса позволяет исследовать движение расплава, перенос тепла и примеси в широком диапазоне динамических, тепловых и геометрических параметров. При этом необходима про-

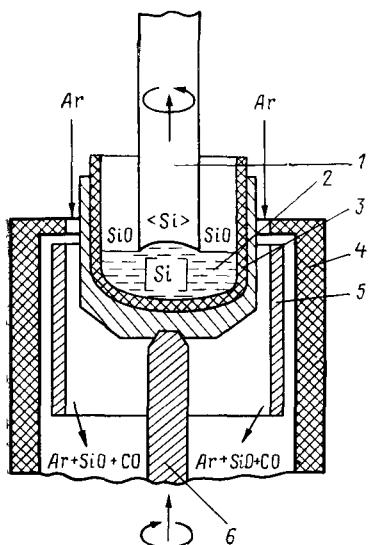


Рис. 4.1. Схема установки для выращивания монокристаллов методом Чохральского

1 — монокристалл, 2 — расплав, 3 — тигель, 4 — тепловая изоляция, 5 — нагреватель, 6 — вращающийся вал

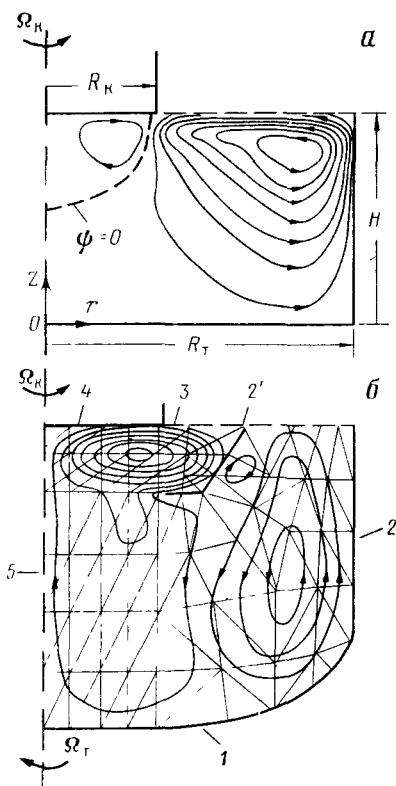


Рис. 4.2. Постановка задачи о выращивании монокристаллов методом Чохральского

а — одинарный тигель, б — двойной тигель (1, 2 — дно и боковая стенка внешнего тигля, 2' — стены внутреннего тигля, 3 — свободная поверхность, 4 — кристалл, 5 — ось симметрии)

верка точности численных решений по данным лабораторного моделирования и результатам натурных плавок [145, 146, 151].

В этом разделе рассматриваются результаты параметрических исследований структуры течения расплава, процессов тепло- и массообмена при отдельном и совместном действии вынужденной и естественной конвекции, обсуждается влияние конвекции на технологические характеристики.

4.1.1. Математические модели и методы решения

Численное моделирование осуществляется на основе решения нестационарных уравнений Навье—Стокса совместно с уравнениями переноса тепла и примеси (приближение Буссинеска). В математической модели предполагается осевая симметрия и учитывается вращение кристалла и гигля, тепловая и концентрационная конвекция (гравитационная и капиллярная). При исследовании технологических режимов выращивания кристаллов распределения температур на стенках тигля, поверхности расплава и в подкристальной области задаются в соответствии с экспериментальными данными.

Взаимодействие расплавленного кремния со стенками кварцевого тигля (см. рис. 4.1) приводит к появлению кислорода в расплаве, который является побочной примесью, оказывающей значительное влияние на совершенство кристаллов. В математической модели переноса кислорода в расплаве кремния предполагается равномерное поступление кислорода от стенок тигля, его полное испарение на поверхности расплава и отвод кислорода в кристалл.

При построении математических моделей используются две формулировки уравнений Навье—Стокса: 1) в переменных ω , ψ , W при численном решении методом конечных разностей в односвязных областях простой геометрической формы с прямолинейными границами (рис. 4.2, а) и 2) в переменных U , V , p , W при решении методом конечных элементов в областях сложной формы, например в двойном тигле (рис. 4.2, б).

Система уравнений Навье—Стокса в переменных U , V , p , W с учетом вращения приведена в разд. 1.2 (см. (1.55)). Эта система в переменных ω , ψ , W имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial t} + U \frac{\partial \omega}{\partial r} + V \frac{\partial \omega}{\partial z} - \frac{U \omega}{r} - \frac{1}{r} \frac{\partial (W^2)}{\partial z} = \\ = \frac{1}{Re} \left(\Delta \omega - \frac{\omega}{r^2} \right) - \frac{Gr}{Re^2} \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{Gr_c}{Re^2} \frac{\partial C}{\partial r}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

$$\Delta \psi - \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} = r \omega,$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + U \frac{\partial W}{\partial r} + V \frac{\partial W}{\partial z} + \frac{U W}{r} = \frac{1}{Re} \left(\Delta W - \frac{W}{r^2} \right),$$

где

$$\omega = \frac{\partial U}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial r}, \quad U = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad V = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}.$$

Здесь U, V, W — компоненты вектора скорости; ω — вихрь, ψ функция тока и Δ — лапласиан скалярной функции,

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

в качестве характерных масштабов выбраны скорость вращения Ω_t и радиус кристалла R_k .

Совместно с системой (1.55) или (4.1) решаются уравнения переноса тепла и примеси

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial t} + U \frac{\partial \theta}{\partial r} + V \frac{\partial \theta}{\partial z} &= \frac{1}{\text{Re Pr}} \Delta \theta, \\ \frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial r} + V \frac{\partial C}{\partial z} &= \frac{1}{\text{Re Sc}} \Delta C. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Границные условия в соответствии со схемой математической модели, приведенной на рис. 4.2, формулируются таким образом:

$$\Gamma_1: W = (\Omega_t / \Omega_k) r, \quad U = V = 0 \quad \text{или } \psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0, \\ \theta = \theta_1, \quad C = 1,$$

$$\Gamma_2: W = (\Omega_t / \Omega_k) r, \quad U = V = 0 \quad \text{или } \psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial r} = 0, \\ \theta = \theta_2, \quad C = 1,$$

$$\Gamma_3: \frac{\partial W}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial U}{\partial z} = \varphi, \quad V = 0 \quad \text{или } \psi = 0, \quad \omega = \varphi, \\ \theta = \theta_3, \quad \text{или } \frac{\partial \theta}{\partial z} = q_3, \\ \text{или } \frac{\partial \theta}{\partial z} = -\text{Bi}(\theta - \theta_0),$$

$$\Gamma_4: W = r, \quad U = V = 0 \quad \text{или } \psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0, \\ \theta = \theta_4, \quad \frac{\partial C}{\partial z} = \text{Bi}_c C,$$

$$\Gamma_5: W = 0, \quad U = 0, \quad \frac{\partial V}{\partial r} = 0 \quad \text{или } \psi = 0, \quad \omega = 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial r} = 0.$$

$$\text{Здесь } \varphi = \frac{M_{\Pi}}{\text{Re Pr}} \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{M_{\Pi_c}}{\text{Re Sc}} \frac{\partial C}{\partial r}.$$

На приводимых в этом разделе рис. 4.2—4.16, линии тока ψ и изотермы θ построены с одинаковыми шагами $\Delta\psi$ и $\Delta\theta$, причем пунктирные линии тока разделяют течения противоположного направления и соответствуют $\psi = 0$; при течении по часовой стрелке $\psi > 0$, в противоположном направлении $\psi < 0$.

Критериальная зависимость решения от параметров задачи имеет следующий вид:

$$\Phi = \Phi(t, r, z, R_k/R_t, H/R_t, \text{Re}, \Omega_t/\Omega_k, \text{Pr}, \text{Gr}, \text{Bi}, M_{\Pi}, \gamma_{\theta}, \text{Sc}, G_{\text{rc}}, \\ \text{Bi}_c, M_{\Pi_c}, \gamma_c). \quad (4.3)$$

Ввиду сложного многопараметрического характера этой зависимости в работе применяется поэтапное частичное моделирование на основе исследования частных случаев (4.3), соответствующих действию отдельных механизмов движения. Например, в практически важном случае вращения кристалла в изотермическом расплаве упрощенная критериальная система имеет вид

$$f = f(t, r, z, R_k/R_t, H/R_t, Re). \quad (4.4)$$

Для технологических режимов выращивания кристаллов кремния большого диаметра характерны большие значения чисел Re , Gr , Mn . В данной работе изучен следующий диапазон основных параметров:

$$\begin{aligned} H/R_t &\leq 1,4, & R_k/R_t &\leq 1, & Re &\leq 3,3 \cdot 10^4, \\ |\Omega_t/\Omega_k| &\leq 3,3, & Pr &= 10^{-2}, 2 \cdot 10^{-2}, 0,5, 15, \\ Gr &\leq 3,3 \cdot 10^8, & Bi &\leq 1, & Mn &\leq 5,1 \cdot 10^4, \\ Sc &= 0,3, 10, 25, & |Bi_c| &\leq 10^2, & |Gr_c| &\leq 10^4. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Численное исследование выполнено методами конечных разностей и конечных элементов.

Основными элементами конечно-разностной схемы (см. разд. 1.1 и работу [145]) являются: монотонная аппроксимация конвективных членов по схеме А. А. Самарского; расщепление исходной двумерной задачи на последовательность одномерных и их неявная разностная аппроксимация; итерационный способ определения граничных условий для вихря. Решение конечно-разностных уравнений осуществляется методом прогонки; уравнение для определения функции тока решается итерационно с оптимальным набором параметров (см. п. 1.1.3).

Основные этапы решения задачи методом конечных элементов (см. разд. 1.2 и работу [151]) включают генерацию сетки конечных элементов для заданной (сложной) области, аппроксимацию компонент скорости и давления соответственно квадратичными и линейными базисными функциями, вариационную формулировку уравнений МКЭ по методу Галеркина и их решение фронтальным методом. Разработанные численные методы реализованы в виде комплексов программ на Фортране для ЭВМ ЕС-1040, -1055М (см. п. 6.1.2 и разд. 6.2).

Для тестов численных решений использованы известные аналитические решения и данные других работ по численному моделированию [160, 192, 251]. На рис. 4.3, а показаны распределения радиальной компоненты скорости для изотермического течения жидкости в тигле, вызванного вращением кристалла при $R_k/R_t = 1$, $Re = 100$ (сплошные линии), и аналитическое решение для случая бесконечных дисков ², один из которых вращается (пунктир). При $r \geq 0,5$ аналитическое решение непригодно из-за влияния на течение боковых стенок тигля.

² Верхний диск моделирует поверхность кристалла, нижний — дно тигля.

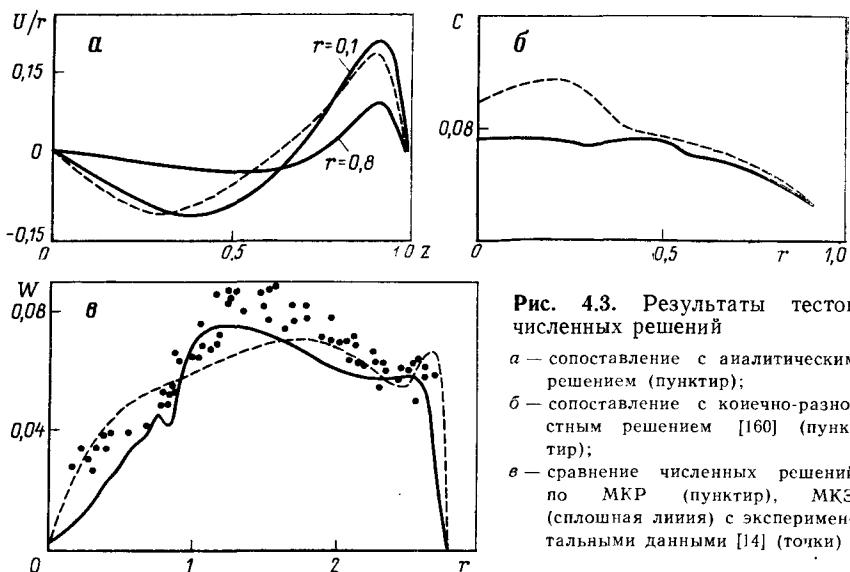


Рис. 4.3. Результаты тестовых численных решений

- а — сопоставление с аналитическим решением (пунктир);
- б — сопоставление с конечно-разностным решением [160] (пунктир);
- в — сравнение численных решений по МКР (пунктир), МКЭ (сплошная линия) с экспериментальными данными [14] (точки)

На рис. 4.3, б для сравнения приведено распределение кислорода на поверхности кристалла по результатам нашего расчета (сплошная линия) и по данным работы [160] (пунктир). Видно удовлетворительное совпадение результатов численного моделирования как по структуре течения, так и по распределению поля температуры и примесей (фосфор, кислород).

На рис. 4.3, в приведены профили окружной компоненты скорости при $z=1,53$, $Re=1240$ (сплошная линия — МКЭ, пунктир — МКР, точки — эксперимент). При сопоставлении профилей радиальной, осевой и окружной компонент скорости для вызванного вращением кристалла стационарного изотермического течения жидкости в модели метода Чохральского установлено удовлетворительное количественное соответствие результатов расчетов и данных эксперимента [14]. Следует отметить, что результаты, полученные по МКЭ, лучше соответствуют экспериментальным данным. Для случая неизотермического течения жидкости, вызванного совместным действием тепловой, термокапиллярной конвекции и вращения кристалла, характерные масштабы течения под кристаллом и у стенки, полученные в расчете, соответствуют экспериментальным данным.

4.1.2. Изотермические течения расплава и механизмы распределения примеси

Изотермичность течения предполагает отсутствие градиентов температур и естественно-конвективных механизмов движения, что позволяет рассматривать это условие как важный предельный случай, реализуемый в невесомости.

Вращение кристалла. Вращение кристалла, расположенного на поверхности жидкости и соосного с тиглем, создает центробежное силовое поле, которое является причиной течения жидкости в меридиональной плоскости. Следуя принятой при изучении устойчивости течения схеме [13], различают следующие основные режимы: основное стационарное одновихревое течение, стационарное течение с вторичными вихрями, переходный колебательный режим осесимметричных и трехмерных течений, последние из которых упорядочены в азимутальном направлении, а также турбулентный режим течения.

В диапазоне малых чисел Рейнольдса интенсивность течения жидкости слабая, в циркуляции участвуют слои, сосредоточенные вблизи поверхности диска. С увеличением числа Рейнольдса до $Re=688$ интенсивность течения возрастает настолько, что весь объем жидкости вовлекается в общую циркуляцию (рис. 4.4, а). Увеличение числа Рейнольдса до значения $Re=1240$ при глубине заполнения тигля $H/R_t \geq 0,7$ приводит к появлению вблизи оси слабого вторичного течения. Образование вторичного течения связано с наличием боковых границ, представляющих преграду для радиального движения жидкости.

Отметим, что при вращении бесконечного диска в неограниченном объеме жидкости радиальное движение вызвано лишь действием центробежных сил вдоль всей поверхности диска и не ограничено стенками. Поэтому увеличение количества движения сопровождается усилением радиального движения и не оказывает обратного влияния на течение вблизи оси. Особенности течения в виде вторичных вихрей «грушевидной» формы являются в некотором смысле обратным эффектом движения жидкости в ограниченном объеме. Для иллюстрации этого эффекта на рис. 4.4, б приведена картина течения в тигле; тонкая структура подкристального течения, наблюдаемая в эксперименте, подтверждает результаты расчетов.

В лабораторной модели метода Чохральского потеря устойчивости течения существенно зависит от глубины жидкости. Так, при $H/R_t = 0,7$ она наблюдается для $Re \geq 2,7 \cdot 10^3$. Это несколько расширяет представление о пороге возникновения неустойчивости в замкнутых объемах вращающейся жидкости, так как этот порог заметно ниже известного критического значения $Re \approx 3 \cdot 10^5$, определенного экспериментально для изотермических течений жидкости при вращении диска в неограниченном пространстве. Причем если в последнем случае появление колебаний связано только с потерей устойчивости течения в пограничном слое, то в модели метода Чохральского наблюдаются несколько различных по своей структуре механизмов колебаний, зависящих от параметров H/R_t , R_k/R_t , Re . Более раннюю потерю устойчивости в лабораторных измерениях по сравнению с численными расчетами можно объяснить наличием некоторого уровня биений при вращении диска и повышением роли азимутальных возмущений, которые отсутствуют в осесимметричной математической модели.

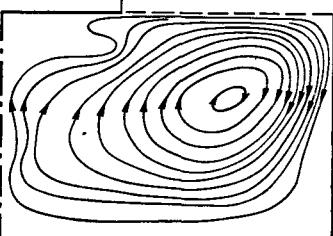
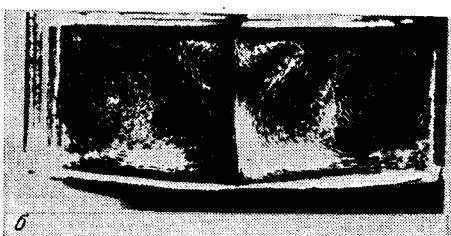
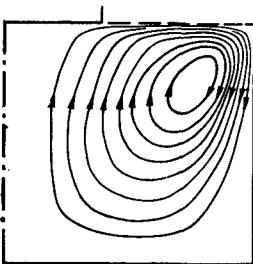
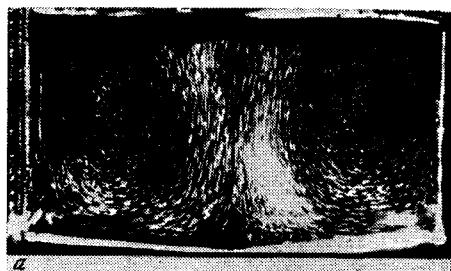


Рис. 4.4. Структура течения по результатам расчетов (справа) и экспериментальные картины течения (слева)

а — $Re = 688$; б — $Re = 1240$

Все режимы течения можно представить на диаграмме в плоскости H/R_t , Re . Линии I, II, III на рис. 4.5 разделяют различные режимы течения: появление (слева от линии I) и развитие (между линиями I-II) основного течения, возникновение вторичного вихря (между II-III), колебательные режимы течения (справа от линии III).

Противовращение кристалла и тигля. При дополнительном вращении тигля течение, вызванное вращением кристалла, усложняется. Наиболее распространенным на практике является режим противовращения кристалла и тигля соответственно со скоростями Ω_k и Ω_t . По сравнению с предыдущим случаем структура течения становится зависимой от значения дополнительного параметра Ω_t/Ω_k . При этом несколько усложняется управление течением. Например, при небольших значениях параметра $|\Omega_t/\Omega_k| = 0,1$ ($Re = 688$) обнаружена зависимость структуры течения от начальных условий. В этом случае одновременное увеличение скоростей вращения кристалла и тигля от состояния покоя вызывает двухвихревое течение (рис. 4.6, а) и, наоборот, отдельная раскрутка тигля практически не изменяет меридионального течения, вызванного вращением кристалла (рис. 4.6, б).

При увеличении скорости вращения тигля до значений параметра $|\Omega_t/\Omega_k| = 0,5$ течение в обоих случаях имеет двухвихревую структуру, включающую подкристальную циркуляцию от

Рис. 4.5. Диаграмма устойчивости течения при вращении кристалла в изотермическом расплаве

Сплошные линии построены по данным эксперимента [13], точки — численные расчеты

Рис. 4.6. Структура течения при противовращении кристалла и тигля при $Re=688$, $\Omega_t/\Omega_k=-0,1$

a — в начальный момент (состояние покоя, течение отсутствует); *b* — начальное течение соответствует отдельному вращению кристалла

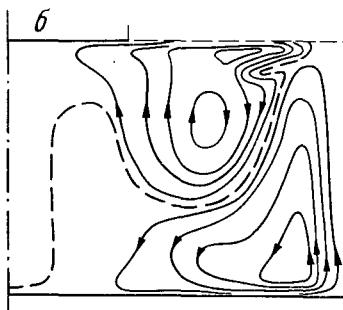
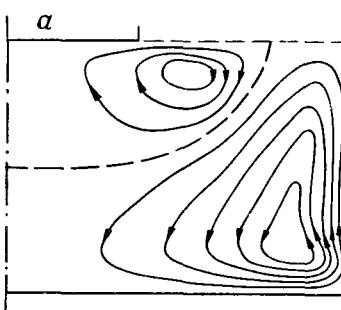
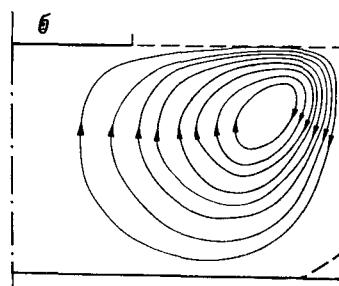
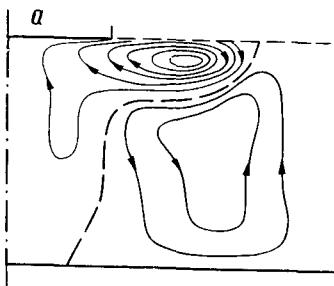
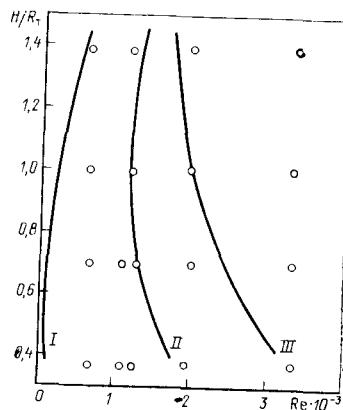


Рис. 4.7. Структура течения при противовращении кристалла и тигля при $\Omega_t/\Omega_k=-0,5$

a — $Re=688$; *b* — $Re=1,57 \cdot 10^4$

вращения кристалла и циркуляцию противоположного направления от вращения тигля (рис. 4.7, *a*). Дальнейшее увеличение скорости вращения тигля при $0,5 < |\Omega_t/\Omega_k| \leq 3,3$ незначительно изменяет масштабы двухвихревого течения и лишь приводит к количественному перераспределению интенсивностей подкристального и пристеночного течений. Заметим, что стабилизация

положения границы двух потоков (пунктирная линия на рис. 4.7, а) при таком изменении параметра Ω_t/Ω_k существенно ограничивает перенос тепла и примеси от стенок тигля к поверхности кристалла и, таким образом, может быть использована для управления процессом кристаллизации при отсутствии естественной конвекции (например, в условиях невесомости).

Увеличение числа Рейнольдса при неизменности параметра Ω_t/Ω_k соответствует одновременному ускорению кристалла и тигля. При $Re=3,3 \cdot 10^3$, $\Omega_t/\Omega_k=-0,1$ возникает двухвихревое течение, при котором подкристальный вихрь проникает до дна тигля; окружное движение характеризуется вращением совместно с тиглем практически всего объема жидкости, за исключением тонкого покристального слоя. При более значительном увеличении числа Рейнольдса до $Re=1,57 \cdot 10^4$ и $\Omega_t/\Omega_k=-0,5$ возникают слабые колебания положения границы, разделяющей два вихря (одна из мгновенных картин этого течения показана на рис. 4.7, б). В этом случае граница двух потоков начинается на свободной поверхности вблизи боковой стенки тигля, опускается в глубь жидкости, поднимается к кромке кристалла, затем опускается ко дну тигля на значительную глубину и заканчивается на оси. При этом для подкристального вихря характерно наличие довольно узкой области торможения радиального потока вблизи места встречи с другим потоком и существование интенсивного подъемно-опускного движения ($\psi_{\max}=1,1 \cdot 10^{-2}$), проникающего на значительную глубину. Особенностью течения, вызванного вращением тигля ($\psi_{\min}=-1,2 \cdot 10^{-2}$), для этого диапазона параметров является наличие узкого пограничного слоя вблизи стенок тигля и квазитвердый характер окружного движения около боковой стенки тигля.

Особенности течения в двойном тигле. В технологической практике для более эффективного управления потоками в подкристальной области используется дополнительный внутренний тигель, позволяющий стабилизировать течение и улучшить однородность расплава вблизи поверхности растущего кристалла [242]. В этом случае анализ течения выполнен методом конечных элементов (см. вариант расчетной сетки на рис. 4.2, б).

При ограниченности подпитки из внешнего тигля для малой ширины зазора $\Delta R_d/R_d=0,37$ (ΔR_d — ширина зазора, R_d — радиус дна внутреннего тигля) и одновременной раскрутке кристалла и тигля из состояния покоя до $Re=100$, $\Omega_t/\Omega_k=-0,1$ во внутреннем тигле возникает одновихревая циркуляция от вращения кристалла, распространяющаяся через зазор во внешний тигель (рис. 4.8, а). За счет действия центробежных сил при вращении внутреннего тигля циркуляция в зоне между внутренним и внешним тиглями усиливается и, обтекая внутренний тигель, распространяется до дна. При этом вблизи стенок внешнего тигля возникает циркуляция противоположного направления, вызванная его вращением. В случае вращения кристалла и двойного тигля в одном направлении ($\Omega_t/\Omega_k=0,1$) течение в

подкристальной области замыкается во внутреннем тигле, а во внешнем тигле разбивается на три вихря, наиболее значительные из которых связаны с вращением внешнего тигля и действием внешней поверхности вращающегося внутреннего тигля (рис. 4.8, б). В обоих случаях окружное движение соответствует вращению большей части жидкости в направлении вращения тигля, за исключением небольшой подкристальной области, вращающейся совместно с кристаллом.

При большой ширине зазора ($\Delta R_d/R_d = 0,72$) отличия течения при противовращении кристалла и двойного тигля ($Re = 100$, $\Omega_t/\Omega_k = -0,1$), связанные с увеличением ширины зазора, состоят в ослаблении подкристальной циркуляции во внешнем тигле за счет уменьшения внешней поверхности внутреннего тигля и ее вклада в движение, а также в распространении циркуляции от вращения внешнего тигля на большую область (см. рис. 4.2, б). При этом в подкристальной области по-прежнему преобладает течение от вращения кристалла, интенсивность циркуляции противоположного направления несколько меньше и практически вся жидкость во внутреннем тигле вращается совместно с кристаллом.

Распределение примеси. Электрофизические, оптические и другие важные свойства кристаллов определяются уровнем концентрации и однородностью распределения примесей в период процесса кристаллизации. Выше было показано, что при отдель-

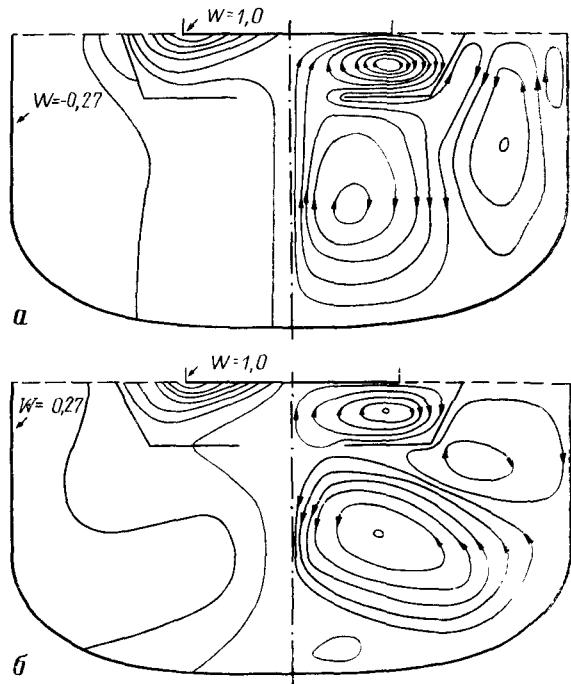


Рис. 4.8. Течение в двойном тигле при $Re = 100$
а— $\Omega_t/\Omega_k = -0,1$;
б— $\Omega_t/\Omega_k = 0,1$.

Слева от оси симметрии показаны изолинии окружной скорости, справа — линии тока

ном вращении кристалла и при противовращении кристалла и тигля ($0,1 \leq |\Omega_t/\Omega_k| \leq 3,3$) возникает циркуляция, охватывающая подкристальную область (см. рис. 4.6). Последнее приводит к радиальной однородности распределения примеси на поверхности кристаллизации [150], поэтому наиболее важным остается вопрос об уровне содержания примеси в кристалле.

При получении монокристаллического кремния особенно актуален вопрос о влиянии течения на перенос кислорода от стенок тигля к кристаллу. Эта задача решена при граничных условиях, соответствующих равномерной подпитке расплава кислородом на стенках тигля ($C_{\text{SiO}}=1$) и испарению кислорода на свободной поверхности ($C_{\text{SiO}}=0$). Исследовано изменение концентрации кислорода в кристалле в зависимости от числа Рейнольдса и параметра Ω_t/Ω_k . Остальные параметры были фиксированы: $Sc=25$; $Bi_c=-15,6$; $H/R_t=0,7$; $R_k/R_t=0,36$.

Установлено, что при отсутствии движения расплава (диффузионный режим) в подкристальной области возникает радиально-равномерное распределение кислорода с малым уровнем его концентрации ($C_{\text{SiO}}=0,02$), что связано со значительным испарением кислорода на свободной поверхности вблизи кристалла.

Вынужденное движение расплава за счет вращения кристалла и тигля приводит к более интенсивному переносу кислорода и к перераспределению его содержания в расплаве. Концентрация кислорода определяется структурой течения в объеме расплава и зависит от значения параметра Ω_t/Ω_k . Последнее связано с тем, что переход от одновихревой к двухвихревой структуре течения при увеличении параметра Ω_t/Ω_k приводит к отделению подкристальной циркуляции от стенок тигля, подпитывающих расплав кислородом, за счет образования циркуляции от вращения тигля.

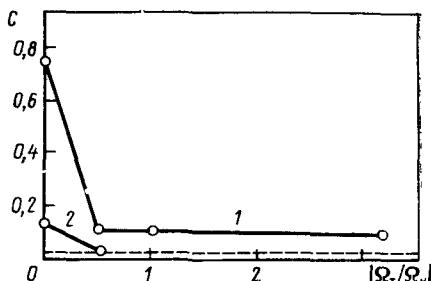
При отдельном вращении кристалла ($\Omega_t/\Omega_k=0$) кислород от стенок тигля переносится непосредственно в подкристальную область, что приводит к высокому уровню его содержания на поверхности кристалла ($C_{\text{SiO}}=0,65$).

Особенности течения, вызванные увеличением числа Рейнольдса до $Re=1,5 \cdot 10^4$ и связанные с возникновением вторичных вихрей в подкристальной области и вблизи боковой стенки тигля (см. рис. 4.4, б), приводят к заметному понижению уровня концентрации в кристалле ($C_{\text{SiO}}=0,12$) ввиду того, что наличие вторичной подкристальной циркуляции препятствует проникновению масс жидкости с более высокой концентрацией примеси к поверхности кристалла.

При дополнительном противовращении тигля ($\Omega_t/\Omega_k=-0,5$, $Re=688$) содержание кислорода в кристалле также существенно понижается за счет образования двухвихревой структуры течения и отделения подкристальной циркуляции от стенок тигля (см. рис. 4.7, а). Дальнейшее увеличение относительной скорости вращения тигля до $\Omega_t/\Omega_k=-3,3$ при $Re=688$ не приводит

Рис. 4.9. Распределение концентрации примеси (кислород) в зависимости от параметра Ω_t/Ω_k

$Sc = 25$,
 $Bi_c = -15,6$,
 1 — $Re = 688$,
 2 — $Re = 1,57 \cdot 10^4$,
 штриховая линия —
 режим диффузии



к качественному изменению структуры двухвихревого течения и поэтому не сопровождается изменением содержания кислорода на поверхности кристалла, которое по-прежнему равно 0,12.

Значительное увеличение числа Рейнольдса до $Re = 1,57 \cdot 10^4$ в случае противовращения при $\Omega_t/\Omega_k = -0,5$ приводит к тому, что наибольшая концентрация кислорода возникает вблизи боковой стенки тигля, причем в остальном объеме, и в частности на поверхности кристалла, кислород практически отсутствует. Это связано с интенсивным движением жидкости под свободной поверхностью, где происходит значительное обеднение кислородом (см. рис. 4.7, б).

Суммарная зависимость концентрации кислорода в кристалле от значения параметра Ω_t/Ω_k при $Re = 688$ и $1,57 \cdot 10^4$ и для режима диффузии представлена на рис. 4.9. Анализ этой зависимости показывает, что изменение скорости вращения тигля Ω_t/Ω_k от 0 до $-0,5$ соответствует наибольшему уменьшению концентрации кислорода: от 0,65 до 0,12 при $Re = 688$ и от 0,12 до 0,02 при $Re = 1,57 \cdot 10^4$, причем в последнем случае уровень концентрации понижается до величины, соответствующей режиму диффузии.

4.1.3. Некоторые закономерности неизотермического течения и распределение примеси в расплаве

Тепловая конвекция. Распределение температуры в расплаве зависит от интенсивности теплообмена на свободной поверхности, способа подвода тепла к стенкам тигля, градиентов температуры и геометрических параметров. Сравнительно сложный характер распределения изотерм можно отметить даже при равномерном нагреве стенок тигля в режиме теплопроводности (штриховые линии на рис. 4.10, б).

В поле силы тяжести неоднородность температурного поля приводит к тепловой конвекции и перераспределению изотерм в объеме расплава (сплошные линии на рис. 4.10): расплав нагревается вблизи дна и боковой стенки тигля, поднимается вверх и движется к поверхности кристалла, вблизи которой охлаждается и затем опускается вниз; по вытянутости изотерм заметно зна-

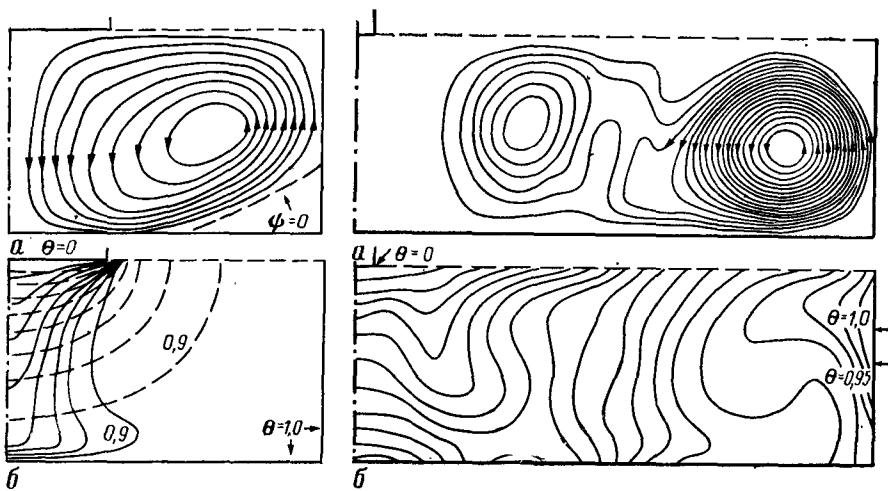


Рис. 4.10. Термовая конвекция при $\text{Gr} = 10^7$, $\text{Pr} = 10^{-2}$

a — линии тока, *б* — изотермы (штриховые линии — изотермы при отсутствии движения (режим теплопроводности))

Рис. 4.11. Течение и теплообмен на начальном участке процесса

$R_K/R_T = 0.03$, $Re = 147$, $\Omega_T/\Omega_K = 0.33$, $\text{Gr} = 10^5$, $\text{Pr} = 0.02$, $H/R_T = 0.37$, *а* — линии тока; *б* — изотермы

чительное влияние движения расплава на теплообмен ($\text{Gr} = 10^7$, $\text{Pr} = 10^{-2}$).

Влияние вращения кристалла и термокапиллярные эффекты. В процессе выращивания увеличение скорости вращения и диаметра кристалла приводит к увеличению числа Рейнольдса, которое определяется как $Re = \Omega_k R_k^2 / v$. При этом возрастает вклад вынужденной конвекции от вращения кристалла и возникает подкристальная циркуляция, оттесняющая от поверхности кристаллизации естественно-конвективное течение [204]. От масштаба подкристальной циркуляции зависит характер теплообмена между расплавом и кристаллом и, следовательно, кривизна фронта кристаллизации, являющаяся одной из основных характеристик качества кристалла.

При выращивании монокристаллов границу тепловой и вынужденной конвекции на свободной поверхности расплава нужно контролировать. Положение этой границы вне поверхности кристалла соответствует полному обтеканию кристалла вынужденным течением, при котором в подкристальной области наблюдаются плоские изотермы. При проникновении течения, вызванного тепловой конвекцией, под кристалл происходит искривление поверхности кристаллизации и, как следствие, ухудшение качества растущего кристалла.

Наиболее резкие изменения в структуре течения происходят на стадии разрашивания кристалла от размеров затравки до заданного диаметра. Рассмотрим их несколько подробнее.

На начальной стадии разрашивания диаметра кристалла ($R_k/R_t=0,03$; $Re=147$) преобладает циркуляция, вызванная действием тепловой конвекции (рис. 4.11, а): наиболее интенсивное движение происходит вблизи боковой стенки тигля, где расплав прогревается до максимальной температуры, поднимается вверх, а затем охлаждается вблизи свободной поверхности и опускается ко дну тигля. При этом вытянутость тигля в радиальном направлении ($H/R_t=0,37$) и дополнительный нагрев дна тигля приводят к появлению в центральной области тигля более слабого подъемно-опускного движения, вовлеченного с течением вблизи боковой стенки в единую циркуляцию. Особенности распределения температур в расплаве связаны с наличием этих двух областей подъемно-опускного движения и характеризуются вытянутостью изотерм вблизи боковой стенки и в центральной области расплава по направлению движения (рис. 4.11, б).

В конечном периоде разрашивания диаметра кристалла (при $R_k/R_t=0,4$, $Re=5,3 \cdot 10^3$) возникает интенсивная подкристальная циркуляция ($\Psi_{\max}=8,28 \cdot 10^{-3}$), которая изменяет характер и интенсивность течения, вызванного тепловой конвекцией ($\Psi_{\min}=-4,87 \cdot 10^{-2}$). При этом граница двух потоков отдалена от кромки кристалла на расстояние $X=(r-R_k)/(R_t-R_k)=0,2$ (рис. 4.12, а) и поле температуры характеризуется переходом от однородного к неоднородному радиальному распределению при приближении к боковой стенке тигля (рис. 4.12, б). Влияние этих изменений проявляется в распределениях теплового потока из расплава в кристалл, приведенных для начала и конца периода разрашивания диаметра кристалла (рис. 4.12, в). Отметим, что неоднородное распределение теплового потока, характерное для начального периода выращивания, сменяется при увеличении диаметра кристалла более однородным распределением в подкристальной области, что вызвано появлением циркуляции от вращения кристалла.

Зависимость границы потоков тепловой и вынужденной конвекции является многопараметрической (4.3). На основе численного моделирования установлены количественные зависимости радиальной координаты этой границы на поверхности расплава от критериев Gr/Re^2 и M_p (рис. 4.13). При этом участок I соответствует начальному периоду выращивания кристалла, увеличению диаметра от размеров затравки до фиксированного максимального значения, т. е. от $R_k/R_t \ll 1$ до $R_k/R_t \approx 0,3 \div 0,5$. В этом случае $X < 0$, что соответствует преобладанию в расплаве тепловой конвекции: вынужденное течение либо отсутствует, либо находится под кристаллом. Значение $X=0$ характеризует усиление подкристальной циркуляции и оттеснение границы тепловой и вынужденной конвекций к кромке кристалла. Подобный переход в структуре течения вызывает изменение в характере

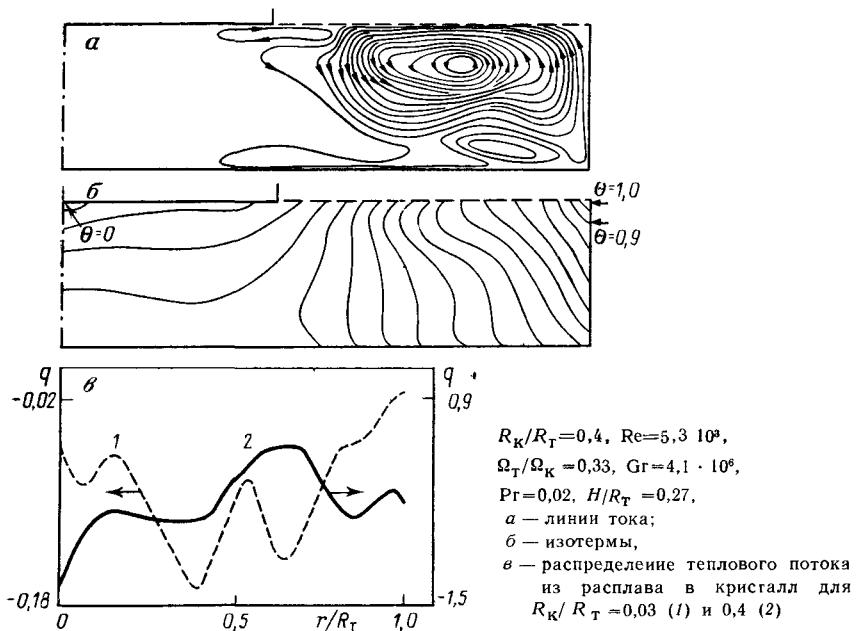


Рис. 4.12. Течение и теплообмен в период времени, соответствующий максимальному диаметру кристалла

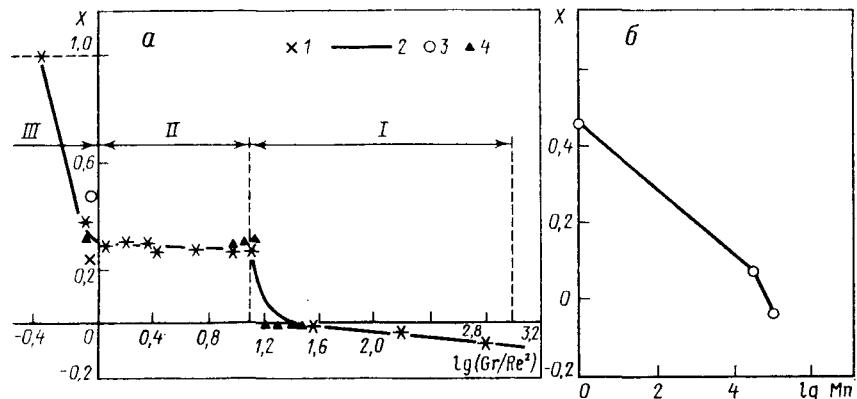


Рис. 4.13. Зависимость положения границы тепловой и вынужденной конвекции на поверхности жидкости X от соотношения параметров Gr/Re^2 (а) и от числа Mn (б)

1 — $Pr = 0,02$, 2 — $0,5$, 3 — 15 , 4 — данные, полученные при выращивании монокристаллов гранатовой структуры

теплообмена между расплавом и кристаллом, что приводит к изменению формы фронта кристаллизации (инверсии) и оказывает значительное влияние на свойства кристалла [81].

Граница перехода, согласно работе [204], удовлетворительно согласуется с результатами численного моделирования и соответствует критериальному соотношению $\lg(\text{Gr}/\text{Re}^2) = 1,6$. При $X > 0$ происходит наиболее значительное усиление подкристальной циркуляции, отеснение границы тепловой и вынужденной конвекций от кромки кристалла на поверхности расплава до $X = -0,3$, что в целом соответствует окончанию периода разрашивания диаметра кристалла. Этому случаю отвечает участок II (рис. 4.13, а), характеризующий период выращивания кристалла максимального диаметра и развитый двухвихревой режим течения, при котором положение разделяющей потоки поверхности $X = 0,3$ сохраняется при значительном изменении критериального соотношения Gr/Re^2 . Наконец, участок III (рис. 4.13, а) характеризует преобладание в тигле вынужденного течения от вращения кристалла, при котором граница двух потоков может достигать боковой стенки тигля ($X = 1$).

На положение границы гидродинамических потоков влияет также значение числа Прандтля: большие числа Pr соответствуют большему смещению границы потоков от кромки кристалла к боковой стенке тигля.

Более существенное влияние на положение границы тепловой и вынужденной конвекций оказывает термокапиллярная конвекция, воздействие которой учтено при $\text{Pr} = 15$ (рис. 4.13, б).

Экспериментальные данные, полученные визуальной фиксацией положения границы гидродинамических потоков при выращивании монокристаллов гранатовой структуры и приведенные на рис. 4.13, а, удовлетворительно согласуются с результатами численного моделирования. При этом фронт кристаллизации, близкий к плоскому, соответствует положению границы $X = 0,3$, что совпадает с данными структурного анализа.

Для практического применения установленной зависимости (рис. 4.13, а) необходимо изменять скорость вращения кристалла в период процесса выращивания с учетом параметров, влияющих на границу тепловой и вынужденной конвекций (уровень расплава в тигле, разность температур и др.).

Особенности тепловой конвекции при противовращении кристалла и тигля. Противовращение кристалла и тигля ($\text{Re} = 3300$, $\Omega_r/\Omega_k = -0,1$) приводит к изменению структуры тепловой конвекции ($\text{Gr} = 10^7$, $\text{Pr} = 10^{-2}$), что можно заметить при сравнении соответствующих картин течения, приведенных на рис. 4.10 и 4.14. В обоих случаях наиболее интенсивное течение сосредоточено вблизи боковой стенки тигля, где происходит нагрев расплава и подъем его вверх. Однако радиальный масштаб опускного течения при противовращении кристалла и тигля существенно уменьшается за счет появления в подкристальной области слабой циркуляции противоположного направления (рис. 4.14, а).

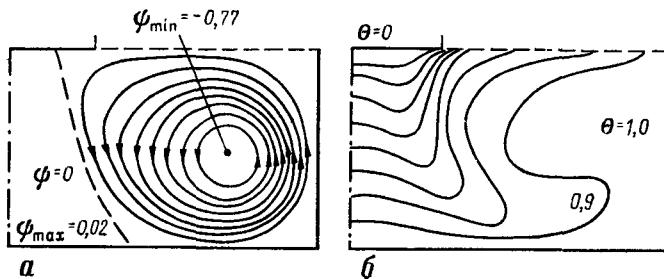


Рис. 4.14. Линии тока (а) и изотермы (б) при противовращении кристалла тигля и равномерном нагреве стенок тигля при $Re=3,3 \cdot 10^3$, $\Omega_t/\Omega_k=-0,1$, $Gr=10^7$, $Pr=10^{-2}$

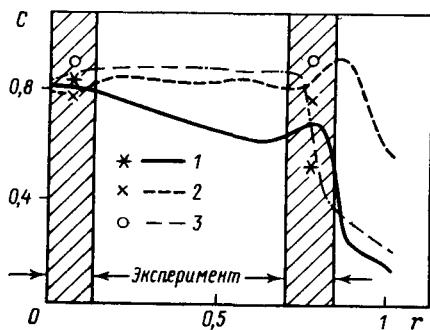


Рис. 4.15. Радиальное распределение примеси (кислород) при донном нагреве тигля при $Gr=8,5 \cdot 10^7$, $Pr=10^{-2}$, $Sc=25$

1 — $Re=2,3 \cdot 10^3$, 2 — $8,8 \cdot 10^3$, 3 — $2,1 \cdot 10^4$, точки — экспериментальные данные

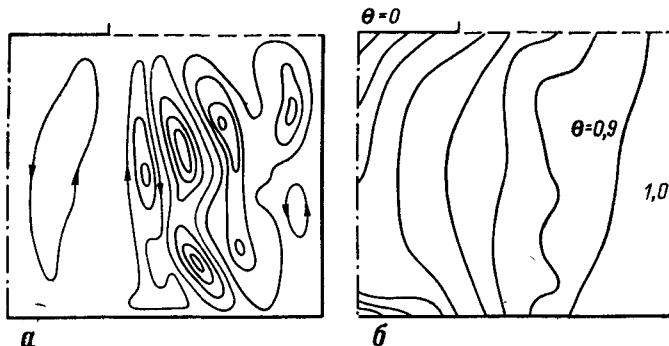


Рис. 4.16. Мгновенные картины линий тока (а) и изотерм (б) в колебательном режиме при $Re=2,1 \cdot 10^4$, $Gr=2,2 \cdot 10^8$, $Pr=10^{-2}$, $\Omega_t/\Omega_k=-0,5$

При другом способе нагрева стенок тигля, например боковом, можно получить дробление подкристального течения на ряд вторичных вихрей [150], что приводит к увеличению теплообмена в периферийных областях кристалла по сравнению с центральными и вызывает возрастание радиальной неоднородности теплоотдачи из расплава в кристалл. Наоборот, созданием преимущественно донного нагрева тигля можно добиться расширения вторичной циркуляции на всю подкристальную область. По этой причине донный нагрев используется в ряде случаев на практике.

ке для получения монокристаллов с однородным поперечным распределением примесей [36]. Анализ конкретных условий тепло- и массообмена в расплаве показывает, что при донном нагреве тигля и при значениях режимных параметров $Gr = 8,5 \cdot 10^7$, $Rg = 10^{-2}$, $Sc = 25$ изменение числа Рейнольдса от $2,3 \cdot 10^3$ до $2,1 \cdot 10^4$ приводит к значительному выравниванию распределения концентрации примеси (кислорода) на фронте кристаллизации (рис. 4.15).

При увеличении габаритов ростовых установок и параметров процесса выращивания кристаллов стационарный режим течения и тепломассообмена может сменяться многовихревым, колебательным (рис. 4.16). Колебания температуры в подкристалльной области могут быть причиной неустойчивости фронта кристаллизации, приводящей к полосчатой неоднородности кристаллов. Сравнение с данными натурного эксперимента [163] показало, что амплитуда колебаний температуры для основных гармоник значительно выше в эксперименте, чем при численном моделировании. Последнее можно объяснить недостаточной осевой симметрией течения и теплообмена в ростовой установке.

Таким образом, к настоящему времени получен ряд важных результатов, позволяющих значительно продвинуться в понимании закономерностей конвективных процессов, протекающих в тигле при изменении большого числа режимных параметров (геометрических, динамических, тепловых и др.). Кроме того, приобретен опыт практического применения результатов математического моделирования для оптимизации метода Чохральского, например путем управления границей тепловой и вынужденной конвекций на поверхности расплава [82]. Отметим также, что при решении столь сложных задач оказалась весьма полезной координация работы специалистов разного профиля [14, 36, 82, 163] (по математическому моделированию, лабораторному эксперименту и росту кристаллов).

4.2. ВЛИЯНИЕ ТЕПЛОВОЙ КОНВЕКЦИИ НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИМЕСИ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Направленная кристаллизация является одним из широко применяемых методов получения из расплава полупроводниковых и металлических материалов [102]. Для получения кристалла с заданными свойствами необходимо поддерживать определенные скорость кристаллизации и концентрацию примеси в расплаве у фронта кристаллизации. При горизонтальной направленной кристаллизации в расплаве под действием силы тяжести в неоднородном поле температуры всегда существует тепловая конвекция, которая определяет перенос примеси в расплаве и, следовательно, распределение ее в кристалле.

С целью устранения влияния конвекции на распределение примеси были проведены эксперименты по выращиванию кристаллов на орбитальной станции [125], причем одним из основных методов роста в этих условиях была направленная кристаллизация в ампуле. Полосчатая неоднородность в условиях невесомости исчезла, однако в ряде экспериментов появилась значительная поперечная неоднородность в распределении примеси, не наблюдавшаяся в земных условиях.

Ранее, при исследовании методами численного моделирования влияния тепловой конвекции на распределение температуры в объеме жидкости, был получен фундаментальный результат, заключающийся в том, что при определенной интенсивности конвекции неоднородность температуры в жидкости достигает максимального значения (эффект максимума температурного расслоения) [138]. Было высказано предположение, что полученная в космическом эксперименте значительная неоднородность распределения примеси вызвана тепловой конвекцией, интенсивность которой в невесомости могла быть близкой к интенсивности, соответствующей максимуму неоднородности распределения примеси. Параметрические исследования этого явления на простой модели метода направленной кристаллизации [148], а также отдельные расчеты по модели, учитывающей движение фронта кристаллизации [117], подтвердили возможность появления максимальной неоднородности распределения примеси в условиях слабой тепловой конвекции.

Ниже приводятся результаты более подробного, чем в работе [117], исследования направленной кристаллизации в широком диапазоне параметров с целью определения области максимальной неоднородности распределения примеси и режимов, благоприятных для выращивания однородных кристаллов в условиях невесомости.

4.2.1. Математическая модель процессов тепло- и массообмена при направленной кристаллизации

Рассматривается кристаллизация с постоянной скоростью u_f плоского слоя жидкости толщиной H и длиной L , находящегося в поле постоянной массовой силы, вектор ускорения которой равен \mathbf{g} и составляет угол ϕ с осью y (рис. 4.17). В системе координат Oxy , связанной с движущимся фронтом кристаллизации (компоненты скорости рассматриваются относительно неподвижных границ слоя), уравнения Навье—Стокса в приближении Буссинеска и уравнения конвективного тепломассообмена в безразмерных переменных вихрь ω , функция тока ψ , температура θ и концентрация C имеют следующий вид:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + (U - U_f) \frac{\partial \omega}{\partial x} + V \frac{\partial \omega}{\partial y} = \Delta \omega + \text{Gr} \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \cos \phi + \frac{\partial \theta}{\partial y} \sin \phi \right),$$

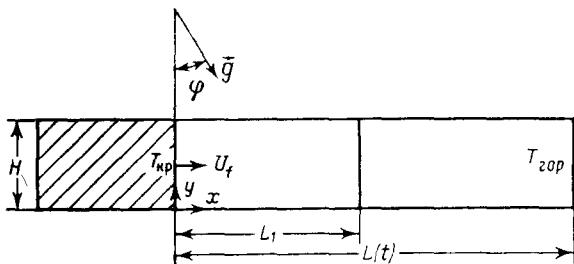


Рис. 4.17. Постановка задачи о направленной кристаллизации

$$\Delta\psi = \omega, \quad U = \partial\psi/\partial y, \quad V = -\partial\psi/\partial x,$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} + (U - U_f) \frac{\partial\theta}{\partial x} + V \frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{1}{Pr} \Delta\theta,$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (U - U_f) \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} = \frac{1}{Sc} \Delta C.$$

Границные условия имеют вид

$$x=0, \quad U=V=\theta=0, \quad \partial C/\partial x = Sc U_f (1-k_0) C,$$

$$x=L/H, \quad U=V=\partial C/\partial x=0, \quad \theta=L/H,$$

$$y=0, \quad y=1, \quad U=V=\partial\theta/\partial y=\partial C/\partial y=0.$$

В этих уравнениях за характерные масштабы времени, длины, скорости, температуры и концентрации приняты соответственно H^2/v , H , v/H , $(T_{top}-T_{kp})H/L$, c_0 . Предполагается, что температура на горячем конце слоя $T_{top}=T_{top}(t)$ меняется так, что средний градиент температуры в жидкости $\gamma=(T_{top}-T_{kp})/L$ остается постоянным (T_{kp} — температура кристаллизации). Решение определяют следующие безразмерные параметры: число Грасгофа $Gr=g\beta_t\gamma H^4/v^2$, число Шмидта $Sc=v/D$, число Прандтля $Pr=v/a$, равновесный коэффициент распределения k_0 , скорость кристаллизации $U_f=u_f H/v$, угол между вектором ускорения массовой силы и фронтом кристаллизации ϕ . Коэффициенты кинематической вязкости v , температуропроводности a , диффузии D , теплового объемного расширения β_t предполагаются постоянными.

До начала кристаллизации стационарная конвекция в жидкости, поля температуры и концентрации описываются следующими уравнениями ($U_f=0$):

$$Gr \cos \phi \left(U' \frac{\partial \omega'}{\partial x} + V' \frac{\partial \omega'}{\partial y} \right) = \Delta \omega' + \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \operatorname{tg} \phi,$$

$$\Delta \psi' = \omega', \quad U' = \partial \psi'/\partial y, \quad V' = -\partial \psi'/\partial x,$$

$$Pr Gr \cos \phi (U' \partial \theta / \partial x + V' \partial \theta / \partial y) = \Delta \theta, \quad C = 1.$$

В этих уравнениях сделана замена переменных: $(U', V', \psi', \omega') = (U, V, \phi, \omega)/(Gr \cos \phi)$. Далее будем рассматривать медленные течения жидкости с малыми числами Прандтля или Грас-

гофа в предположении, что число Рэлея $Ra = Gr Pr \ll 10^2$. В этом случае конвективным переносом тепла можно пренебречь, и поле температуры будет иметь вид $\theta = x$.

Рассмотрим влияние на течение числа Грасгофа. Когда течение медленное, переменные U' , V' , ω' , ψ' не зависят от числа Грасгофа. В этом случае можно пренебречь конвективными членами и в уравнении движения. При увеличении числа Грасгофа нелинейные конвективные члены начинают оказывать влияние на решение, что приводит к зависимости переменных U' , V' от числа Грасгофа (рис. 4.18) и появлению в ядре течения вторичных ячеек. Это течение было исследовано в работе [44] методами линейной теории устойчивости, в работе Е. Л. Тарунина (см. [40]) с помощью разностного метода в предположении периодичности течения и в работах [227, 240] в случае слоя конечной длины. Как было показано методами теории устойчивости [245] и в эксперименте [226], сразу же после появления, когда число Грасгофа достигает значения примерно 10^4 , эти ячейки, имеющие в трехмерном представлении вид поперечных валов, теряют устойчивость по отношению к пространственным колебательным возмущениям. Эта неустойчивость, по-видимому, приводит к осцилляциям в полях течения, температуры и концентрации в жидкости и может быть причиной неоднородности распределения примеси в кристалле.

В дальнейшем при исследовании влияния конвекции на распределение примеси ограничимся медленными течениями, что справедливо до значений числа Грасгофа, приблизительно равных 10^4 (см. рис. 4.18). Таким образом, до начала кристаллизации течение, поля температуры и концентрации описываются следующими уравнениями:

$$\Delta\omega' + 1 = 0,$$

$$\Delta\psi' = \omega', \quad U' = \partial\psi'/\partial y, \quad V' = -\partial\psi'/\partial x,$$

$$\theta = x, \quad C = 1.$$

Решение этих уравнений с граничными условиями $\psi' = \partial\psi'/\partial n = 0$ зависит от удлинения слоя L/H . Будем предполагать, что $L \gg H$, и в дальнейших расчетах используем приближенное аналитическое решение этой задачи, полученное в работе [42]:

$$\psi'(x, y) = \frac{Gr}{24} \left[\frac{1}{4} - \left(y - \frac{1}{2} \right)^2 \right]^2 \left[1 - e^{-\alpha x} \left(\cos \beta x + \frac{\alpha}{\beta} \sin \beta x \right) \right],$$

$$U'(x, y) = \frac{Gr}{6} \left[\frac{1}{4} - \left(y - \frac{1}{2} \right)^2 \right] \left(y - \frac{1}{2} \right) \times \\ \times \left[1 - e^{-\alpha x} \left(\cos \beta x + \frac{\alpha}{\beta} \sin \beta x \right) \right],$$

$$V'(x, y) = \frac{Gr}{24} \left[\frac{1}{4} - \left(y - \frac{1}{2} \right)^2 \right] e^{-\alpha x} \sin \beta x \left(\frac{\alpha^2}{x} + x \right),$$

$$\alpha = 4,150, \quad \beta = 2,286.$$

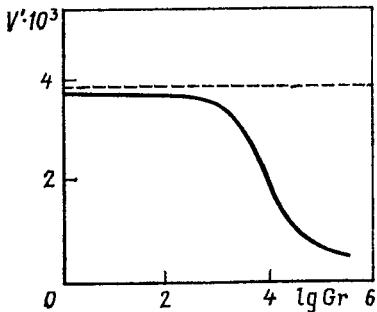


Рис. 4.18. Зависимость скорости течения V' (0,1; 0,5) от числа Грасгофа
Штриховая линия — решение [42]

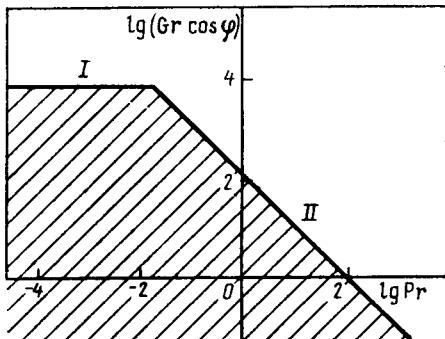


Рис. 4.19. Режимы течения и теплообмена в слое с продольным градиентом температуры

Пусть в начальный момент времени $t=0$ начинается кристаллизация с постоянной скоростью U_f . Будем предполагать, что скорость кристаллизации мала и движение фронта не изменяет поля течения, описываемого приведенными выше формулами. Тогда уравнение для определения концентрации примеси в расплаве будет иметь вид

$$\begin{aligned} \partial C / \partial t' + (\text{Gr Sc} \cos \varphi U' - U_f \text{Sc}) \partial C / \partial x + \\ + \text{Gr Sc} \cos \varphi V' \partial C / \partial y = \Delta C. \end{aligned}$$

Начальное условие: $C=1$.

Границные условия:

$$y=0, \quad y=1, \quad \partial C / \partial y=0,$$

$$x=0, \quad \partial C / \partial x=U_f \text{Sc} (1-k_0) C,$$

$$x=L_1/H, \quad \partial C / \partial x=0 \quad \text{при } 0 < y < 0,5,$$

$$C=1 \quad \text{при } 0 < y < 1.$$

Здесь введен новый масштаб времени: $t'=t/\text{Sc}$.

Границные условия для концентрации вдали от фронта стоятся на некотором расстоянии от фронта кристаллизации L_1/H (см. рис. 4.17). При этом L_1/H выбирается так, чтобы решение у фронта кристаллизации не зависело от L_1/H .

На рис. 4.19 на плоскости параметров $\text{Gr} \cos \varphi$ и Pr заштрихована область, где предполагается справедливым решение поставленной задачи. В области выше прямой I нужно принимать во внимание нелинейные члены в уравнении движения. В области правее прямой II течение влияет на теплообмен и необходимо учитывать конвективный перенос тепла.

В рамках сформулированной задачи концентрация примеси в жидкости у фронта кристаллизации будет определяться следующей зависимостью:

$$C = C(x, y, t, k_0, G, \text{Pe}).$$

Здесь введены обозначения: $G = \text{Gr} \cdot \text{Sc} \cos \varphi$, $\text{Pe} = U_s \cdot \text{Sc} = u_f H / D$ (число Пекле). Аналогичные определяющие параметры получены в работах [202, 203] при исследовании направленной кристаллизации с помощью метода, предложенного в работе [246] и основанного на анализе порядков величин.

Полученное двумерное уравнение конвективной диффузии с соответствующими граничными условиями и полем течения решалось с помощью явной двухслойной разностной схемы, для аппроксимации конвективных членов использовались центральные разности. Шаг по времени выбирался из условий устойчивости явной схемы [122], а шаг сетки по пространству определялся точностью и условием монотонности решения для симметричной схемы (см. п. 1.1.2). Расчет проводился на ЭВМ ЕС-1055М с использованием матричного процессора (см. разд. 2.1).

4.2.2. Результаты параметрических исследований

Рассмотрим диффузионный режим переноса примеси в расплаве ($G=0$). В этом случае распределение примеси однородно вдоль фронта и задача сводится к одномерной.

На рис. 4.20 показано распределение примеси в кристалле и расплаве в некоторый момент времени для $k_0 < 1$. Определим толщину концентрационного пограничного слоя в расплаве у фронта кристаллизации следующим образом:

$$\delta = [C(0) - C(\infty)] / |\partial C / \partial x|_{x=0} = [C(0) - 1] / |\partial C / \partial x|_{x=0}.$$

Учитывая граничное условие при $x=0$, получим

$$\delta = \frac{C(0) - C(\infty)}{\text{Pe} (1 - k_0) C(0)} = \frac{1 - C(\infty)/C(0)}{\text{Pe} (1 - k_0)}.$$

Это выражение справедливо и в конвективном режиме кристаллизации, а в случае диффузионного стационарного режима ($C(\infty) = 1$, $C(0) = 1/k_0$) получим

$$\delta_D = (1 - k_0) / (\text{Pe} (1 - k_0)) = 1 / \text{Pe} = DH / u_f.$$

Таким образом, введенное ранее число Пекле Pe является отношением протяженности фронта кристаллизации H к толщине стационарного диффузионного пограничного слоя D/u_f .

Рассмотрим влияние интенсивности конвекции (параметр G) на распределение примеси. Увеличение интенсивности конвекции приводит к появлению поперечной (вдоль фронта кристаллизации) неоднородности в распределении примеси, уменьшению средней концентрации примеси на фронте кристаллизации и толщины концентрационного пограничного слоя (рис. 4.21). За-

Рис. 4.20. Распределение примеси в расплаве и кристалле в диффузионном режиме ($k_0 < 1$)

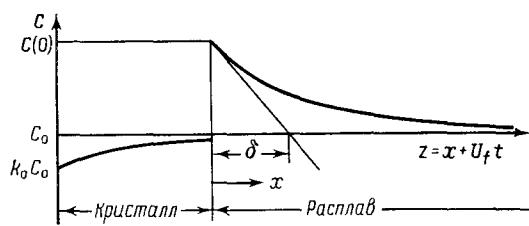
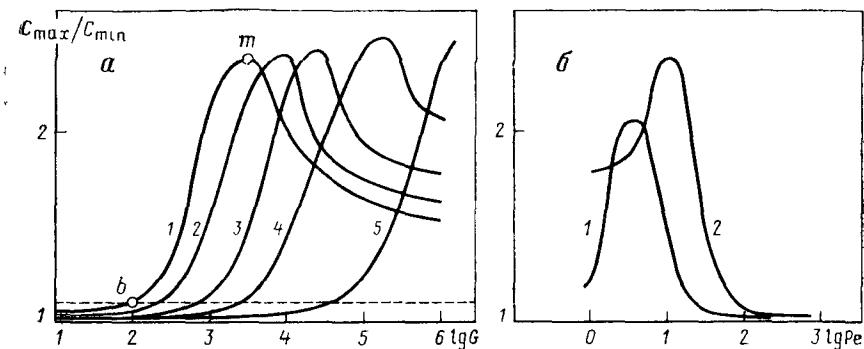
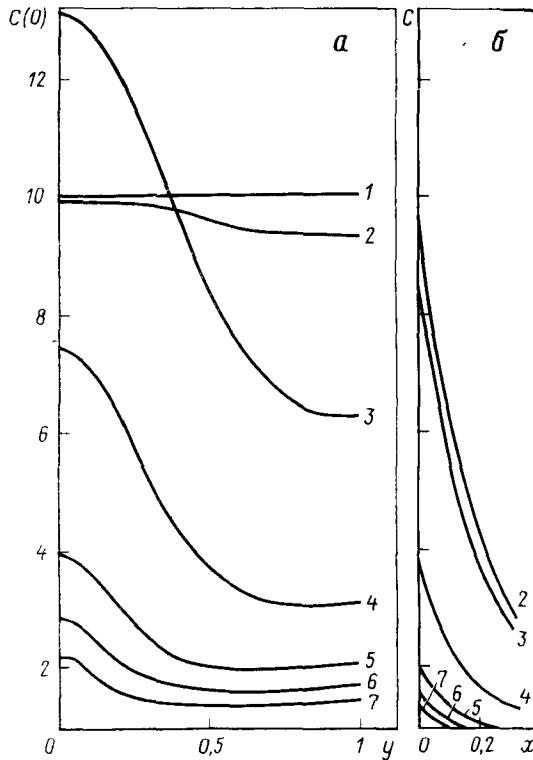


Рис. 4.21. Распределение примеси в расплаве вдоль фронта (а) и по нормали к нему ($y=0,5$) (б) при различных значениях параметра G ($k_0=0,1$, $Pe=5$)

- 1 — $G=0$,
- 2 — 10^2 ,
- 3 — 10^3 ,
- 4 — $3 \cdot 10^3$,
- 5 — 10^4 ,
- 6 — $3 \cdot 10^4$,
- 7 — 10^5

Рис. 4.22. Зависимости поперечной неоднородности в распределении примеси от параметра G (а) и числа Pe (б) при $k_0=0,1$

- а*
- 1 — $Pe=5$,
 - 2 — 10,
 - 3 — 18,
 - 4 — 30,
 - 5 — 90,
 - 6 —
- б*
- 1 — $G=10^3$,
 - 2 — 10^4



висимость поперечной неоднородности, которую в дальнейшем будем характеризовать отношением максимального значения концентрации примеси к минимальному на фронте кристаллизации

$$\frac{C_{\max}}{C_{\min}} = \max_y C(0, y) / \min_y C(0, y),$$

от интенсивности перемешивания в расплаве при различных числах Пекле показана на рис. 4.22, а. Начиная с некоторого значения параметра G , течение оказывает влияние на распределение примеси (точка b , $C_{\max}/C_{\min} - 1 = 0,1$, т. е. неоднородность распределения примеси 10%), в точке m неоднородность достигает максимального значения, дальнейшее увеличение интенсивности перемешивания приводит к уменьшению величины C_{\max}/C_{\min} . Как влияет изменение числа Пекле Re , т. е. скорости кристаллизации, на поперечную неоднородность при различных интенсивностях перемешивания, видно из рис. 4.22, б.

На основе рис. 4.22 можно построить диаграмму режимов кристаллизации в плоскости параметров G и Re , которая позволяет оценить величину неоднородности распределения примеси при различных условиях кристаллизации. На рис. 4.23 кривая 1 соответствует 10%-ной поперечной неоднородности, кривая 2 — максимальной. Область ниже кривой 1 будет соответствовать почти диффузионному режиму кристаллизации, а область около кривой 2 — значительной поперечной неоднородности.

На рис. 4.24 показана зависимость C_{\max}/C_{\min} от параметра G при различных значениях равновесного коэффициента k_0 . Видно, что при $k_0 \gg 1$ величина неоднородности оказывается больше, чем при $k_0 < 1$, и положение максимума неоднородности (точка m) смещается в область больших значений параметра G .

Рассмотрим, как зависит от интенсивности перемешивания в расплаве и скорости кристаллизации эффективный коэффициент распределения примеси k_e , определяемый отношением концентрации примеси в кристалле на фронте кристаллизации $c(0, y)$ к концентрации примеси в расплаве далеко от фронта кристаллизации $c(\infty)$. Будем предполагать, что $c(\infty) = c_0$, тогда получим

$$k_e(y) = c(0, y)/c_0 = k_0 C(0, y),$$

где $k_e(y)$ зависит от координаты вдоль фронта. В практике кристаллизации обычно используется средний (поперек кристалла) эффективный коэффициент распределения \bar{k}_e , который будем определять следующим образом:

$$\bar{k}_e = \int_0^1 k_e(y) dy = k_0 \int_0^1 C(0, y) dy = k_0 \bar{C}(0).$$

Здесь $\bar{C}(0)$ — средняя концентрация в расплаве у фронта кристаллизации.

На рис. 4.25 показаны зависимости эффективного коэффициента \bar{k}_e от интенсивности перемешивания, скорости кристаллизации

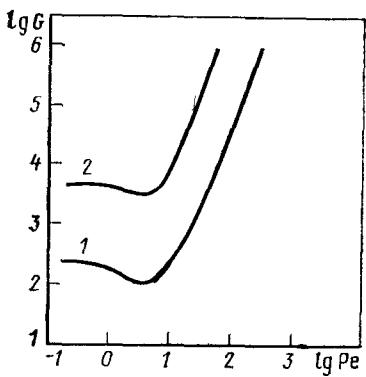


Рис. 4.23. Режимы роста кристаллов методом направленной кристаллизации в зависимости от поперечной неоднородности распределения примеси ($k_0=0,1$)

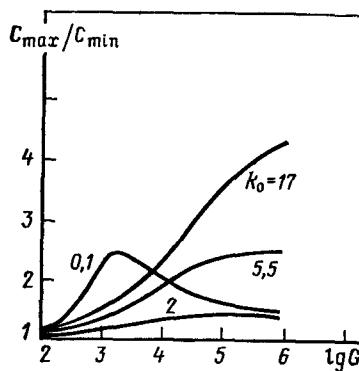


Рис. 4.24. Зависимость поперечной неоднородности распределения примеси от параметра G при различных значениях коэффициента распределения k_0 ($\text{Pe}=5$)

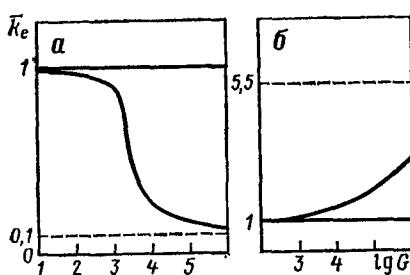


Рис. 4.25. Зависимость эффективного коэффициента распределения от параметра G ($\text{Pe}=5$)
а — $k_0=0,1$; б — $k_0=5,5$

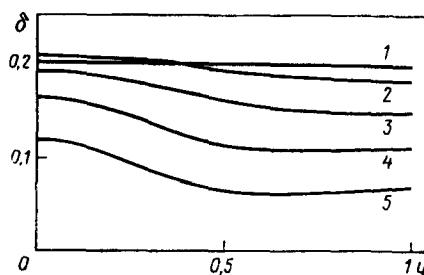


Рис. 4.26. Локальная толщина концентрационного пограничного слоя при различных G ($\text{Pe}=5$, $k_0=0,1$)
1 — $G=0$, 2 — 10^3 , 3 — $3 \cdot 10^3$, 4 — 10^4 , 5 — 10^5

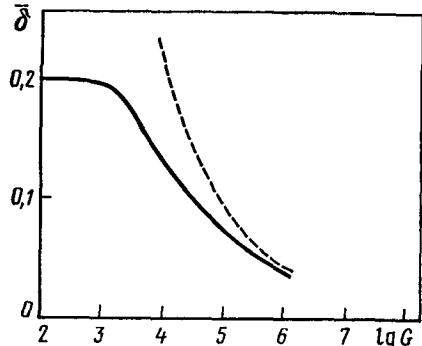


Рис. 4.27. Зависимость средней толщины концентрационного пограничного слоя от параметра G ($\text{Pe}=5$, $k_0=0,1$)

ции и равновесного коэффициента распределения. Можно отметить, что \bar{k}_e особенно резко изменяется в диапазоне параметров, соответствующем области значительной поперечной неоднородности в распределении примеси, а точка перегиба на графиках примерно соответствует максимальной поперечной неоднородности.

Рассмотрим зависимость от параметров толщины концентрационного пограничного слоя. Так же как и для эффективного коэффициента распределения, можно ввести локальную толщину пограничного слоя

$$\delta = [1 - 1/C(0, y)] / [\text{Pe}(1 - k_0)]$$

и среднюю толщину пограничного слоя

$$\bar{\delta} = [1 - 1/\bar{C}(0, y)] / [\text{Pe}(1 - k_0)].$$

На рис. 4.26 показана зависимость локальной толщины пограничного слоя от координаты y . Поскольку δ определяется локальной концентрацией примеси на фронте, изменение толщины пограничного слоя вдоль фронта прямо связано с поперечной неоднородностью распределения примеси (см. рис. 4.21). Легко получить зависимости δ и $\bar{\delta}$ от k_e и \bar{k}_e . Например, $\delta = (1 - k_0 / \bar{k}_e) / [\text{Pe}(1 - k_0)]$.

На рис. 4.27 показана зависимость $\bar{\delta}$ от определяющих параметров. Штриховая линия на этом графике — изменение толщины концентрационного пограничного слоя δ_{BPS} , определенного по модели Бартона—Прима—Слихтера [201],

$$\delta_{\text{BPS}} = (1/\text{Pe}) \ln \left(\frac{1 - k_0}{1 - \bar{k}_e} \frac{\bar{k}_e}{k_0} \right).$$

При значительной интенсивности перемешивания в расплаве $\bar{k}_e \rightarrow k_0$,

$$\delta_{\text{BPS}} \simeq \frac{1}{\text{Pe}} \ln \left[1 + \frac{\bar{k}_e - k_0}{(1 - k_0) k_0} \right] \rightarrow \delta,$$

что видно на рис. 4.27. Однако в области слабого перемешивания величина δ , по-видимому, будет лучше характеризовать действительное распределение примеси у фронта кристаллизации, чем величина δ_{BPS} , которая при $\text{Gr} \rightarrow 0$ стремится к бесконечности.

4.3. КОНВЕКЦИЯ, ТЕПЛО- И МАССООБМЕН В МОДЕЛИ ЖИДКОСТНОЙ ЭПИТАКСИИ

Метод жидкостной эпитаксии (от греческих слов *επί* — на, *τάξις* — расположение в порядке) заключается в кристаллизации слоев из раствора — расплава (разбавленного раствора кристаллизуемого компонента в легкоплавком растворителе) и ис-

пользуется для получения высококачественных полупроводниковых структур для непосредственного применения в приборах.

Существует большое количество модификаций этого метода в зависимости от тепловых условий роста, способа создания пересыщения, геометрии области, занятой расплавом, а также требований к электрофизическим параметрам, структуре, толщине эпитаксиального слоя.

Для изготовления приборов требуются как однослойные, так и многослойные структуры с толщиной слоев от долей микрона до десятков и сотен микрон, поэтому при выращивании эпитаксиальных пленок необходимо знать характер изменения их толщины во времени. Скорость роста эпитаксиального слоя зависит от диффузионных и гидродинамических процессов в растворе—расплаве, поэтому важное значение имеет изучение конвективного движения, наличие которого в экспериментах по жидкостной эпитаксии отмечается рядом авторов [75, 101, 275]. Причинами возникновения конвекции могут быть градиенты концентрации, температуры, сил поверхностного натяжения при наличии свободной поверхности. Непосредственное наблюдение процессов в жидкой фазе весьма затруднено из-за высокой температуры, непрозрачности, малых размеров области, занятой расплавом. Детальный анализ и параметрическое исследование конвективных процессов в модели жидкостной эпитаксии выполняется ниже на основе нестационарных уравнений Навье—Стокса.

4.3.1. Математическая модель процесса жидкостной эпитаксии

Математическая модель процесса жидкостной эпитаксии строится для варианта роста слоев из ограниченного объема насыщенного раствора—расплава в изотермических условиях на две подложки (рис. 4.28) в следующих предположениях: поля течения и концентрации кристаллизуемого компонента двумерные; зависимость $c(T)$ по диаграмме состояния полагается линейной; изменение размеров области за счет роста слоев не учитывается; исходная поверхность подложки полагается плоской; кристаллизация происходит только на подложках; кинетические явления на границе подложка—расплав не рассматриваются; охлаждение раствора—расплава идет с постоянной скоростью, изотермические условия не нарушаются.

Исходная система двумерных уравнений в переменных вихрь ω , функция тока ψ , концентрация C в декартовой системе координат в безразмерной форме имеет вид

$$\omega_t + U\omega_x + V\omega_y = \omega_{xx} + \omega_{yy} + F, \quad (4.6)$$

$$\psi_{xx} + \psi_{yy} = \omega, \quad (4.7)$$

$$C_t + UC_x + VC_y = Sc^{-1}(C_{xx} + C_{yy}), \quad (4.8)$$

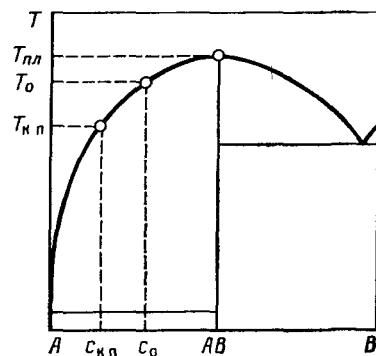
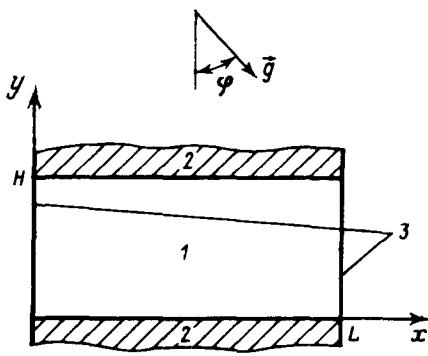


Рис. 4.28. Постановка задачи о жидкостной эпитаксии

1 — раствор—расплав, 2 — подложка, 3 — графитовые стенки

Рис. 4.29. Диаграмма состояния бинарной системы

T_0 , $T_{\text{к.п}}$ — температура начала и окончания процесса эпитаксиального роста; c_0 , $c_{\text{к.п}}$ — концентрация растворенного в А компонента В в начале и конце процесса, $T_{\text{пл}}$ — температура плавления соединения АВ

где $U = \psi_y$, $V = -\psi_x$, $C = c/c_0$, $F = Gr_c(C_x \cos \varphi + C_y \sin \varphi)$. Здесь U , V — проекции вектора скорости на оси x , y соответственно; Sc — число Шмидта; Gr_c — концентрационное число Грасгофа; φ — угол между вектором ускорения g , создаваемого массовыми силами, и осью y ; c_0 — размерная начальная концентрация по диаграмме состояния (рис. 4.29); c , C — текущая размерная и безразмерная концентрации. В качестве масштабов длины, времени, скорости и концентрации выбраны соответственно H , H^2/v , v/H , c_0 , где H — характерный размер (толщина слоя раствора—расплава), v — коэффициент кинематической вязкости.

Границные условия задаются в следующем виде:

$$0 \leq x \leq L/H, \quad y=0, \quad y=1 : C=C_{\text{д.с}},$$

$$x=0, \quad x=L/H, \quad 0 < y < 1 : \partial C / \partial n = 0,$$

где $C_{\text{д.с}}$ — безразмерное значение концентрации по диаграмме состояния ($c_{\text{к.п}}/c_0 \leq C_{\text{д.с}} \leq 1$). На всех границах заданы условия прилипания

$$\psi = 0, \quad \partial \psi / \partial n = 0.$$

Начальные условия

$$\omega_0 = 0, \quad \psi_0 = 0, \quad C_0 = 1.$$

Искомое решение (например, поле концентрации) зависит от координат, безразмерного времени $Fo_D = Dt/H^2$ (D — коэффициент диффузии), значений безразмерных критериев подобия, геометрии области G_1 , начальных условий G_2 , граничных условий G_3 , угла φ и может быть представлено в виде

$$C = f(x, y, Fo_D, Sc, Gr_c, G_1, G_2, G_3, \varphi). \quad (4.9)$$

Установление зависимости (4.9) — основная задача моделирования конвективных процессов в расплаве.

Численное моделирование процесса жидкостной эпитаксии осуществляется на основе методики и комплекса программ (см. гл. 1 и [23]). Уравнения (4.6), (4.8) решаются неявным методом переменных направлений с использованием монотонной аппроксимации (см. п. 1.1.2). Решение уравнения Пуассона (4.7) осуществляется с использованием двух методов: итерационного неявного метода переменных направлений и метода разделения переменных с применением быстрого преобразования Фурье (см. п. 1.1.3). Границные условия для ψ , ω аппроксимируются по методу, изложенному в п. 1.1.4. В процессе счета находились значения функции $Q = Sc^{-1} \int_i C_v d\tau$, характеризующей величину безразмерной массы кристаллизуемого компонента, осевшей на единице длины подложки за время t и определяющей конфигурацию слоя.

При отработке модели выполнены дополнительные тесты методики и некоторые ее модификации. По сравнению с методикой [23] в расчетную схему введена релаксация вихря на границе, согласно которой значения вихря представляются в виде

$$\omega^{n+1} = (1 - \alpha) \omega^n + \alpha \omega^{n+1}, \quad (4.10)$$

где $\alpha \in (0, 1)$ — параметр релаксации. Релаксация осуществляется во внутреннем итерационном цикле (см. п. 1.1.4), в котором наряду с решением уравнений (4.6) — (4.8) на каждом временном слое решается уравнение

$$\omega^{n,s+1} = (1 - \alpha) \omega^{n,s} + \alpha \omega^{n,s+1},$$

где s — индекс итерационного цикла. При выборе α из диапазона 0,3—0,7 временной шаг в модельной задаче при подогреве сбоку жидкости, ограниченной твердыми стенками ($Pr=110$, $Gr=130$), удается увеличить примерно в 10^3 раз.

В зависимости от величины числа Рэлея могут реализовываться как стационарные, так и нестационарные, нерегулярные режимы конвекции, достоверный расчет которых представляет определенные трудности. При отработке методики вначале были выполнены тесты результатов расчетов для модельных задач. Для стационарных режимов тепловой конвекции ($Pr=1$, $Gr=-10^2, 10^4, 10^6$) в квадратной области с твердыми границами при заданных температурах на боковых стенках и линейным профилем температур на верхнем и нижнем основаниях максимальные значения функции тока удовлетворительно согласуются с данными [120].

Нерегулярные конвективные движения реализуются в горизонтальном слое, ограниченном твердыми поверхностями и подогреваемом снизу, при $Pr=0,71$, $Ra=3,8 \cdot 10^5$. На боковых границах ставятся периодические граничные условия с периодом L/H , равным 2,8. Расчеты выполнены на сетках 17×17 , 33×33

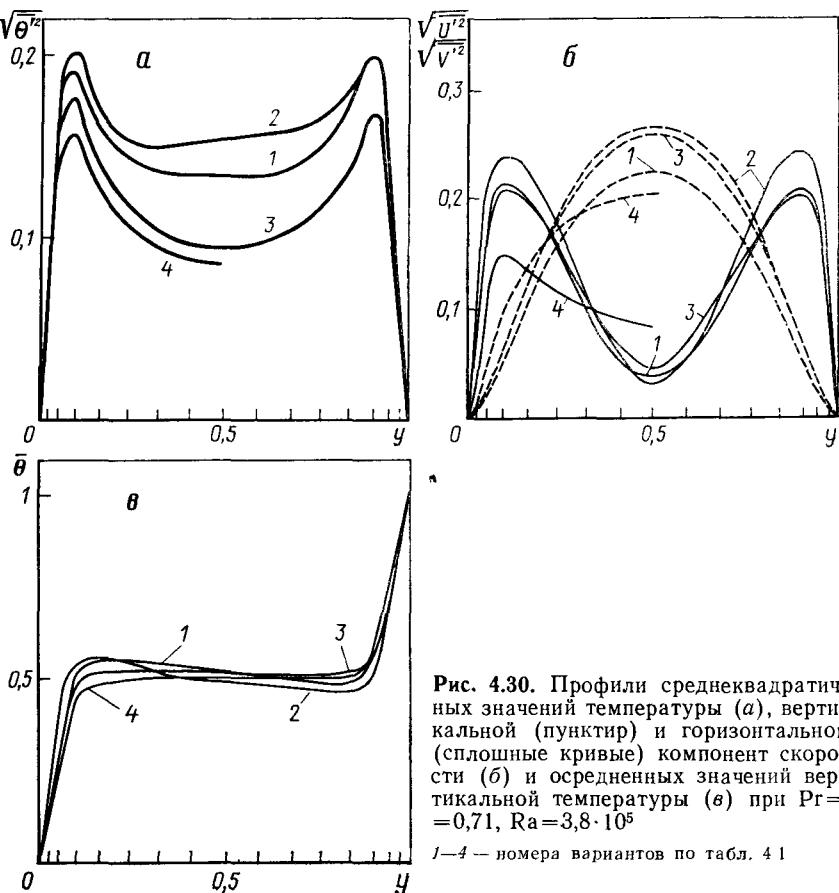


Рис. 4.30. Профили среднеквадратичных значений температуры (а), вертикальной (пунктир) и горизонтальной (сплошные кривые) компонент скорости (б) и осредненных значений вертикальной температуры (в) при $\text{Pr} = 0,71$, $\text{Ra} = 3,8 \cdot 10^5$

1—4 — номера вариантов по табл. 4.1

со сгущением у твердых горизонтальных поверхностей; минимальное расстояние между узлами составляет 0,02 и 0,01 соответственно. Среднеквадратичные значения $\sqrt{\langle f' \rangle^2} = \sqrt{\langle f - \bar{f} \rangle^2}$ компонент скорости и температуры, осредненные по времени и пространству, а также усредненные значения температуры по вертикали ($\bar{\theta} = (\theta_1 - \theta) / (\theta_1 - \theta_2)$, θ_1 , θ_2 — температуры нижнего и верхнего оснований) приведены на рис. 4.30. Для сравнения показаны аналогичные характеристики, полученные в работе [222].

В табл. 4.1 содержатся обобщенные результаты расчетов, варианты 4—6 соответствуют данным из [222] для двумерного и трехмерного случаев. Согласование данных с точки зрения практических задач следует признать удовлетворительным, учитывая большое число исходных предположений и степень неопределенности в коэффициентах переноса.

**Таблица 4.1. Характеристики нерегулярной конвекции
для горизонтального слоя при подогреве снизу
($\text{Pr}=0,71$, $\text{Ra}=3,81225 \cdot 10^6$)**

№ п/п	Сетка	τ	$(V_{\theta^{*2}})^{\max}$	$(V_{U^{*2}})^{\max}$	$(V_{V^{*2}})^{\max}$	$Nu = q/q_0$
1	17×17	10^{-3}	0,2	0,211	0,227	6,6
2	17×17	10^{-4}	0,204	0,244	0,268	7,37
3	33×33	10^{-3}	0,177	0,215	0,262	6,51
4	$33 \times 17 \times 17$	$2,9 \cdot 10^{-2}$	0,157	0,151	0,207	$7,44 \pm 0,29^*$
5	$17 \times 17 \times 17$	$3,1 \cdot 10^{-2}$	0,166	0,163	0,207	$7,75 \pm 0,35^*$
6	17×17	$3,4 \cdot 10^{-2}$	0,167	0,25	0,253	8,6

* Разброс данных указан в работе [222].

4.3.2. Оценка численных значений критериев подобия для бинарных систем полупроводниковых материалов

Анализ процессов, происходящих в жидкой фазе, проведен для растворов—расплавов бинарных систем In—InSb, Ga—GaSb, In—InAs, In—InP, Ga—GaAs, Ga—GaP с учетом диаграмм температура—состав по значениям следующих чисел подобия: $\text{Pr} = v/a$, $\text{Sc} = v/D$, $\text{Ra} = g\beta_t H^3 \Delta T/va$, $\text{Ra}_c = g\beta_c H^3 \Delta c/vD = \text{Gr}_c \text{Sc}$ (a —температуропроводность, β_t , β_c —коэффициенты, характеризующие изменение плотности расплава с изменением температуры и концентрации, ΔT , Δc —характерная разность температур и концентраций).

Конкретные значения физико-химических параметров раствора—расплава зависят от температуры и концентрации растворенного компонента. Концентрация, в свою очередь, определяется температурой и изменяется в соответствии с диаграммой состояния [164]. Экспериментальные данные по зависимости параметров насыщенных растворов рассматриваемых систем от температуры в литературе отсутствуют, за исключением данных по плотности системы Ga—GaAs. Значения $\rho(T, c)$ рассчитывались по значениям $\rho(T)$ с учетом диаграмм состояния (рис. 4.31); аналогично вычислялись значения $v(T, c)$, $a(T, c)$.

В табл. 4.2 представлены критерии подобия для растворов—расплавов бинарных систем полупроводниковых материалов, рассчитанные по данным из работ [32, 67, 108, 206]. Значения Ra , Ra_c получены для земных условий ($g=9,8 \text{ м/с}^2$). Общей закономерностью рассматриваемых систем является существенное преобладание конвекции, обусловленной градиентом концентрации, над тепловой (рис. 4.32), что позволяет изучать процесс жидкостной эпитаксии, исключив из рассмотрения тепловую конвекцию.

Для каждой из рассматриваемых систем для горизонтально-го варианта жидкостной эпитаксии существует критическая тол-

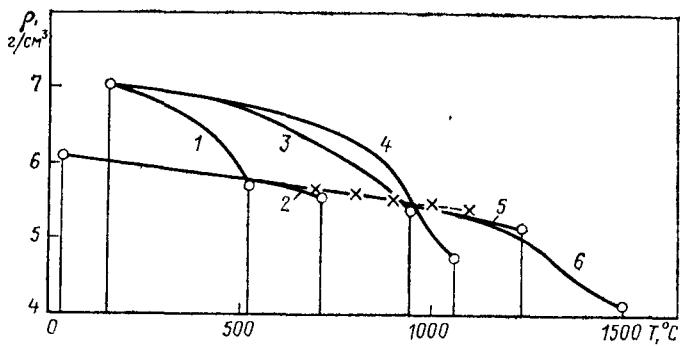


Рис. 4.31. Зависимости плотности насыщенных растворов—расплавов бинарных систем от температуры

1 — In — InSb, 2 — Ga — GaSb, 3 — In — InAs, 4 — In — InP, 5 — Ga — GaAs, 6 — Ga — GaP, сплошные кривые — рассчитанные значения, крестики — экспериментальные данные

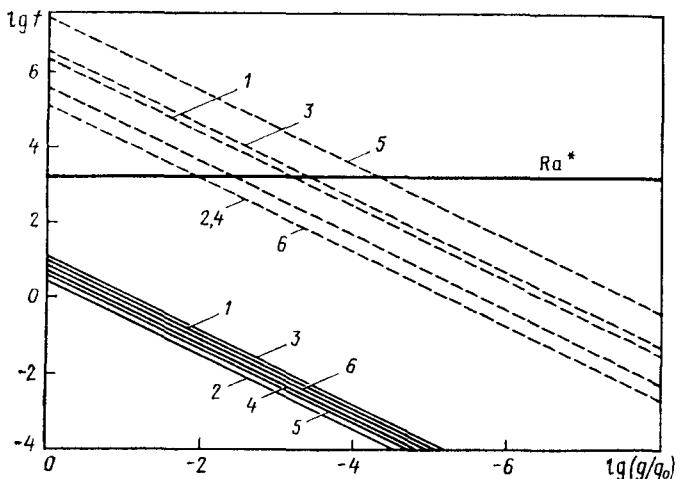


Рис. 4.32. Зависимость чисел Ra (сплошные линии) и Ra_c (штриховые) от величины g/g_0 при $H=0,1$ см, $\Delta T=10^\circ$

1 — In — InSb, 2 — Ga — GaSb, 3 — In — InAs, 4 — In — InP, 5 — Ga — GaAs, 6 — Ga — GaP

шина слоя расплава H^* , соответствующая критическому значению числа Рэлея Ra^* : при $H < H^*$ движения нет. С увеличением H в жидкой фазе развивается конвекция в соответствии с диаграммой режимов [225] в зависимости от ориентации слоя и размеров подложки.

На рис. 4.32 представлены границы диффузионного режима в зависимости от величины микроДскорений для каждой системы, построенные исходя из значения $\text{Ra}^*=1708$ для модельной задачи о конвекции в горизонтальном слое жидкости, ограниченном твердыми поверхностями и подогреваемом снизу.

Таблица 4.2. Критерии подобия бинарных систем

Система	$\text{Pr} \cdot 10^3$	Sc	$(\text{Ra}/H^3 \Delta T) \cdot 10^{-2}$	$(\text{Ra}_c/H^3) \cdot 10^{-9}$
In — InSb	7	118	8,4	2,4
Ga — GaSb	7,6	32	3	0,14
In — InAs	2,2	55	11	3,9
In — InP	2,1	4	7,4	0,14
Ga — GaAs	5,6	96	4	29
Ga — GaP	4,7	21	5,6	0,38

Примечание. Значения Ra_c получены при $\Delta c = c(T_0) - c(T_{\text{к.п.}})$.

4.3.3. Режимы движения при горизонтальном расположении подложек

Численное моделирование конвекции и массообмена при жидкостной эпитаксии выполнено в диапазоне параметров: число Шмидта $\text{Sc}=50, 100, 200$; температурный интервал роста $\Delta T=30^\circ$; скорость охлаждения раствора—расплава $V_{\text{окл}}=0,25 \div 4^\circ\text{C}/\text{мин}$; толщина области расплава $H=1 \div 2,5 \text{ мм}$; длина подложки $L=6 \div 11 \text{ мм}$; величина $L/H=2,4 \div 11$; уровень ускорений $g=0 \div 2g_0$. Расчеты проводились с использованием равномерных сеток $21 \times 33, 21 \times 65, 21 \times 129, 33 \times 33$ в зависимости от величины L/H . Временной шаг τ брался равным $10^{-3} \div 2 \cdot 10^{-2}$ в зависимости от параметров процесса. Параметр релаксации α в уравнении (4.10) для этой серии расчетов был выбран равным 0,4.

Геометрическая однородность слоя характеризуется величиной

$$Q' = \frac{Q_{\max} - Q_{\min}}{Q_{\max}} \cdot 100\%, \quad (4.11)$$

Q_{\max}, Q_{\min} — максимальное и минимальное значения Q в конце процесса. Разница в толщине слоев между подложками определяется по формуле

$$\Delta Q = \frac{Q_{\text{в}} - Q_{\text{н}}}{Q_{\text{в}}} \cdot 100\%, \quad (4.12)$$

где $Q_{\text{в}}, Q_{\text{н}}$ — безразмерное количество вещества, осевшего на верхней и нижней подложках в конце процесса. Относительная суммарная величина выросших слоев рассчитывается по формуле

$$Q_{\Sigma} = \frac{Q_{\text{в}} + Q_{\text{н}}}{Q_{\text{д.с}}} \cdot 100\%, \quad (4.13)$$

где $Q_{\text{д.с}}$ — максимально возможная безразмерная масса слоя с учетом диаграммы состояния системы.

При численном моделировании горизонтального варианта жидкостной эпитаксии ($\phi=0$) получены слои различной геометрии в зависимости от величины числа Ra_c . На рис. 4.33 представлены распределения вдоль подложек массы кристаллизуемого компонента, по которым оценивается геометрическая однородность слоев. На рис. 4.34 показаны соответствующие поля концентрации и структура движения в расплаве. При $Ra_c=10^6$ распределение концентрации близко к диффузионному. Увеличение

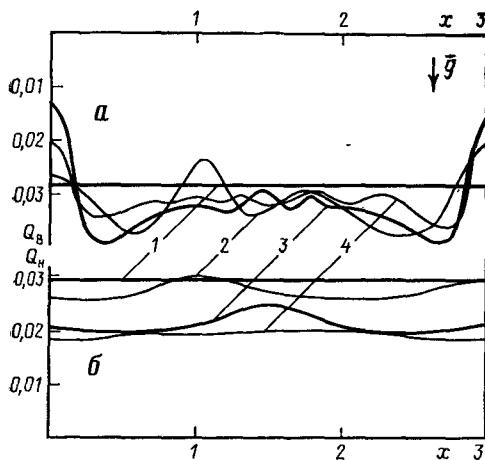
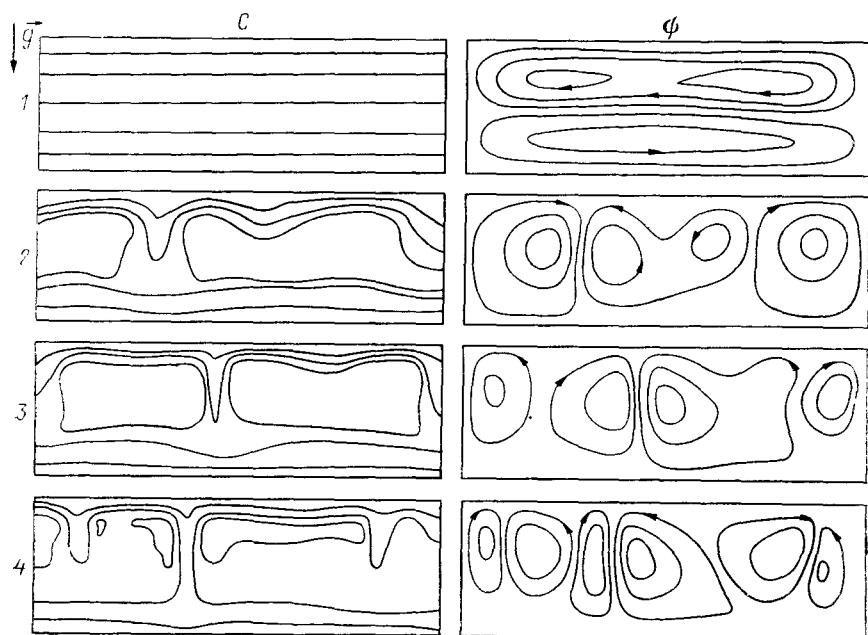


Рис. 4.33. Распределение безразмерной массы кристаллизуемого компонента в конце процесса на верхней (а) и нижней (б) подложках

$Sc=100$, $L/H=3$, $V_{\text{охл}}=1^\circ\text{C}/\text{мин}$;
 $1 - Ra_c = 10^6$, $2 - 10^6$, $3 - 10^7$, $4 - 2 \cdot 10^7$

Рис. 4.34. Изолинии концентрации и функций тока в расплаве
 $Sc=100$, $L/H=3$, $V_{\text{охл}}=1^\circ\text{C}/\text{мин}$,
 $Fo_c = 0,225$, $1 - 4$ — то же, что на
 рис. 4.33 ($1 - \Psi_{\max} = 1,1 \cdot 10^{-6}$, $\Psi_{\min} = -7,2 \cdot 10^{-6}$, $2 - 8,1 \cdot 10^{-2}$, $-7,8 \cdot 10^{-2}$, $3 - 0,22, -0,24$; $4 - 0,23, -0,29$)



Ra_c приводит к развитию у верхней подложки неустойчивости, которая в дальнейшем распространяется на всю область.

В зависимости от числа Ra_c различаются три режима движения:

1) регулярный стационарный режим, наблюдющийся при $Ra_c = 10^6$, что соответствует космическим условиям. В этом случае процесс проходит в режиме, близком к диффузионному, и на обеих подложках получаются практически однородные слои (кривые 1 на рис. 4.33): Q' равно 0,044 % на верхней подложке и 0,031 % — на нижней;

2) регулярный нестационарный режим, который имеет место при $Ra_c = 10^6$ и характеризуется не изменяющейся во времени структурой движения в области. В этом случае на верхней и нижней подложках растут неравномерные слои (кривые 2 на рис. 4.33);

3) нерегулярный нестационарный режим, который реализуется при $Ra_c \geq 10^7$ ($Ra_c = 10^7$ соответствует земным условиям) и характеризуется изменяющейся во времени ячейковой структурой течения. Данный режим отличается повышением геометрической однородности слоев из-за сильного и нерегулярного движения в жидкой фазе (кривые 3, 4 на рис. 4.33).

На рис. 4.35 показано изменение во времени максимального значения функции тока в области для регулярного (кривая 1) и нерегулярного (кривая 2) нестационарных режимов. Максимальная неоднородность наблюдается в слоях, полученных в условиях регулярного нестационарного режима движения, что является следствием общего принципа максимума температурного и концентрационного расслоения в замкнутых объемах, установленного в работе [148]. Для ячейковой конвекции максимальная неоднородность в распределении местного потока тепла вдоль границы была рассмотрена в работе [141].

На рис. 4.36 приведены зависимости величин Q' , ΔQ , Q_z , рассчитанных по формулам (4.11) — (4.13) и характеризующих геометрию слоев, от числа Ra_c . Нелинейный характер зависимости

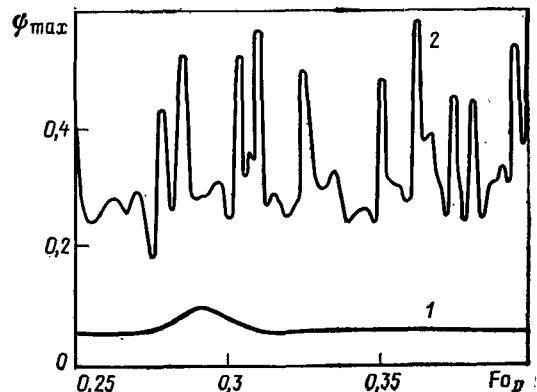


Рис. 4.35. Изменение во времени максимального значения функции тока

1 — $Ra_c = 10^6$, 2 — $Ra_c = 2 \cdot 10^7$

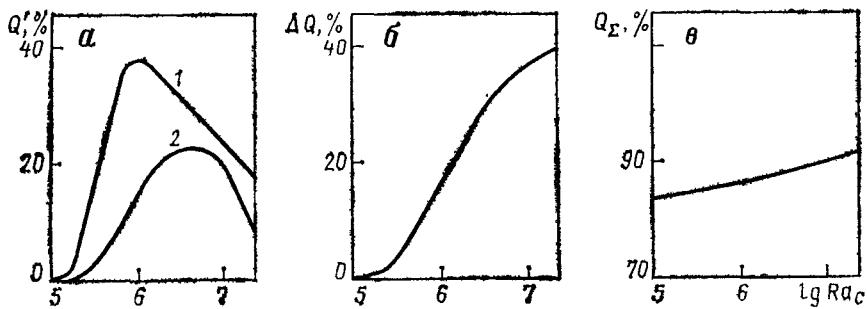


Рис. 4.36. Зависимость геометрических параметров слоев от числа Ra_c

$Sc=100$, $L/H=3$, $V_{\text{окл}}=1^{\circ}\text{C}/\text{мин}$; Q' — геометрическая однородность слоя (1, 2 — слои на верхней и нижней подложках соответственно); ΔQ — разница в толщинах между слоями на верхней и нижней подложках; Q_Σ — относительная суммарная толщина слоев

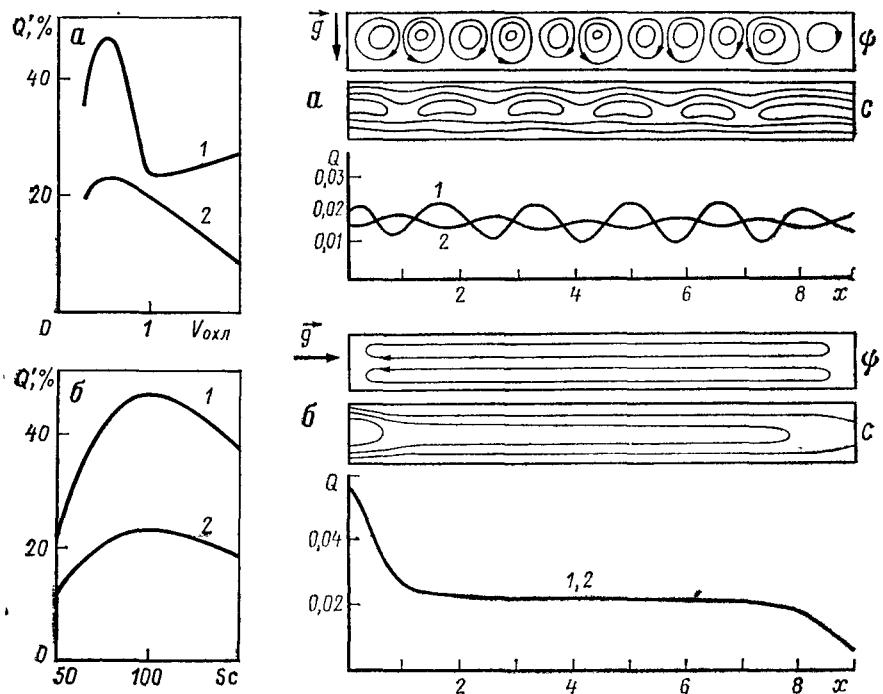


Рис. 4.37. Зависимость геометрической однородности слоев от скорости охлаждения (а) и вязкости (б) раствора—расплава

1, 2 — слои на верхней и нижней подложках соответственно; а — $Sc=100$, $L/H=3$, $Ra_c=10^7$; б — $V_{\text{окл}}=1^{\circ}\text{C}/\text{мин}$, $L/H=3$

Рис. 4.38. Структура движения, поля концентрации и геометрических слоев в горизонтальном (а) и вертикальном (б) вариантах процесса

$Sc=100$, $Ra_c=1,25 \cdot 10^6$, $L/H=9$, $V_{\text{окл}}=1^{\circ}\text{C}/\text{мин}$; 1, 2 — слои на верхней и нижней подложках соответственно

$Q'(\text{Ra}_c)$ связан со сменой режимов движения в области данной геометрии. Для процессов роста эпитаксиальных слоев переход в состояние невесомости способствует уменьшению геометрической неоднородности слоев на верхней и нижней подложках.

Наряду с числом Ra_c на геометрию слоев существенное влияние оказывают скорость охлаждения и вязкость раствора—расплава.

Увеличение скорости охлаждения, как и увеличение числа Ra_c , приводит к усилению нерегулярности течения в области. Величина Q' нелинейно изменяется с ростом $V_{\text{окт}}$, при $V_{\text{окт}} = -0,5 \text{ }^{\circ}\text{C}/\text{мин}$ растут наиболее неоднородные слои на верхней и нижней подложке (рис. 4.37, а).

Изменение вязкости раствора—расплава эквивалентно изменению скорости охлаждения при постоянном значении коэффициента диффузии. На рис. 4.37, б показана зависимость геометрической однородности слоев на верхней и нижней подложках от значений числа Шмидта при $D = \text{const}$.

Геометрия слоев зависит от конфигурации области, занятой раствором—расплавом. Уменьшение величины зазора между подложками способствует росту более однородных слоев на верхней и нижней подложках. Увеличение длины подложек при $H = \text{const}$ практически не сказывается на геометрических параметрах слоев: при $L/H \geqslant 6$ движение в области имеет регулярную ячейковую структуру (рис. 4.38, а).

Таким образом, параметрические исследования процесса жидкостной эпитаксии позволяют сделать вывод о наличии оптимального диапазона значений каждого параметра, при которых растут более однородные по толщине слои.

4.3.4. Зависимость геометрии слоев от расположения подложек

Изменение угла наклона подложек относительно силы тяжести сопровождается сменой режимов движения [225]: ячейковая конвекция Рэлея—Бенара, реализуемая в горизонтальном варианте проведения процесса, переходит в плоскопараллельное движение, характерное для вертикального варианта.

В вертикальном варианте форма слоев одинакова на обеих подложках, с ярко выраженным клином в отличие от горизонтального варианта, когда неравномерность эпитаксиальных слоев по толщине существенно выше для верхней подложки (см. рис. 4.38). Увеличение длины подложек и уменьшение зазора между ними при $\phi = 90^\circ$ приводят к росту более ровных слоев в центральной части подложек. Относительная суммарная толщина слоев практически не зависит от расположения подложек: Q_z изменяется от 90,5% при $\phi = 0$ до 91% при $\phi = 90^\circ$.

Повышению геометрической однородности слоев может способствовать вращение контейнера в процессе роста. Постоянная смена режимов движения приводит к изменению потока раствора—

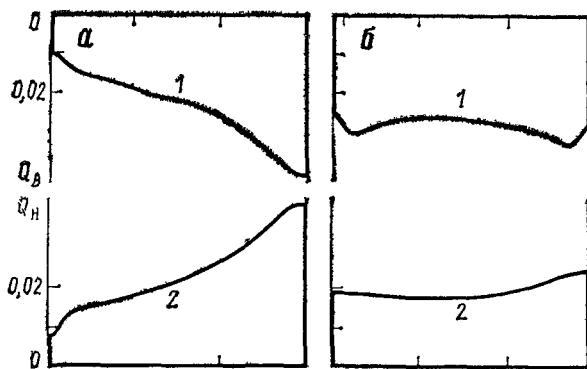


Рис. 4.39. Распределение безразмерной массы кристаллизуемого компонента в конце процесса на верхней и нижней подложках

$Sc=100$, $Ra_c=10^7$,
 $V_{\text{охл}}=1^{\circ}\text{C}/\text{мин}$;
 а — $\Phi_0=0$, $\Omega=1 \text{ об}/\text{ч}$,
 б — 90° , $1 \text{ об}/\text{ч}$,
 в — 90° , $2 \text{ об}/\text{ч}$,
 г — 90° , $4 \text{ об}/\text{ч}$,
 1, 2 — то же,
 что на рис. 4.38

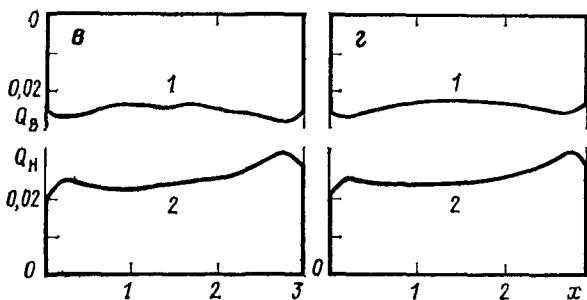
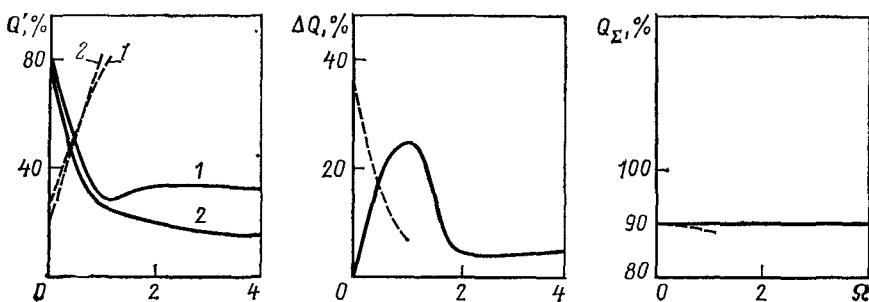


Рис. 4.40. Влияние скорости вращения и исходного расположения подложек на геометрические параметры слоев

Сплошные кривые — $\Phi_0=90^{\circ}$, штриховые — $\Phi_0=0$, 1, 2 — слои на верхней и нижней подложках соответственно



ренного компонента на растущую поверхность. Этот поток определяет конфигурацию слоя (рис. 4.39).

Геометрические параметры слоев зависят от начального расположения подложек Φ_0 , направления и скорости вращения Ω (рис. 4.40). Вращение из горизонтального положения ($\Phi_0=0$, $\Omega \leq 1 \text{ об}/\text{ч}$) способствует усилению неравномерности слоев, из вертикального ($\Phi_0=90^{\circ}$) — ее уменьшению. При $\Omega \geq 2 \text{ об}/\text{ч}$ и $\Phi_0=90^{\circ}$ однородность слоев по толщине практически не зависит от скорости вращения. Разница в толщинах между слоями ΔQ при этих параметрах постоянна. Относительная суммарная величина выросших слоев Q_E от угла Φ_0 и скорости вращения зависит слабо.

4.3.5. Особенности жидкостной эпитаксии в условиях невесомости

Рассмотренная выше математическая модель жидкостной эпитаксии была использована для анализа результатов технологических экспериментов в условиях невесомости при орбитальном полете [30, 31, 140]. Точное значение угла φ в этих условиях неизвестно, поэтому расчеты проведены для $\varphi=0$, 45 и 90° (рис. 4.41).

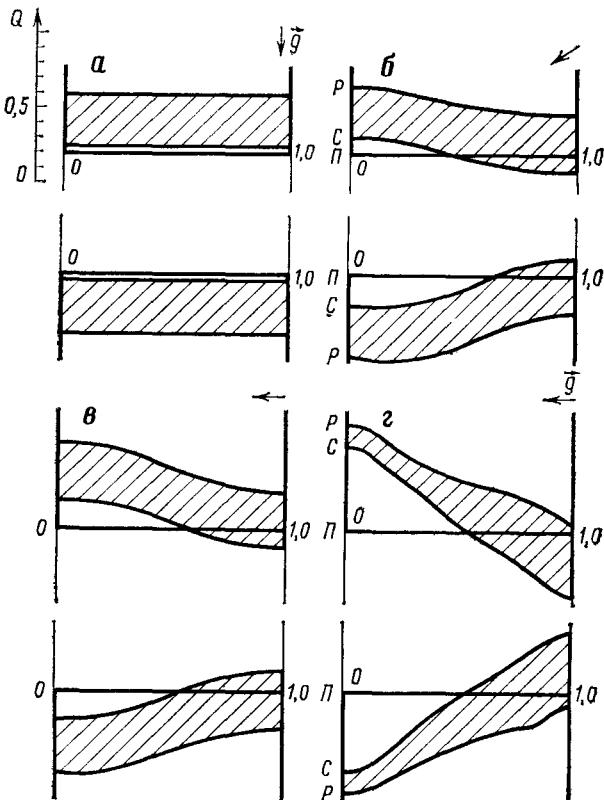


Рис. 4.41.
Геометрия
поверхности
подложек
в режиме
растворения
и роста слоев

$Sc=100$,
 $L/H=1$
 $(L=0,8 \text{ см})$,
 $V_{\text{окhl}}=11,3 \text{ }^{\circ}\text{C}/\text{ч}$,
 P — исходная
подложка,
 P — граница
растворения,
 C — выросший
слой,
 $Q=0,1$
 соответствует
 $h \approx 48,5 \text{ мкм}$.
 $a - \sigma - Ra_C =$
 $= 8,25 \cdot 10^3$
 $(\varphi=0 \text{ (а), } 45 \text{ (б)}$
 $\text{и } 90^\circ \text{ (в))}$,
 $\sigma - Ra_C =$
 $= 8,25 \cdot 10^3$,
 $\varphi=90^\circ$

В результате одного из экспериментов получены ровные слои арсенида галлия толщиной $h_{[10]}=192 \text{ мкм}$ и $h_{[111]}=144 \text{ мкм}$. Из сопоставления с результатами расчетов можно сделать вывод о том, что в орбитальном эксперименте результирующий вектор g был направлен преимущественно перпендикулярно подложкам и его величина составляла $\sim 10^{-5} g_0$.

Таким образом, найдя закономерности изменения толщины и геометрии слоя в зависимости от величины и направления действия массовой силы, можно в результате анализа полученных в эксперименте эпитаксиальных слоев оценить реальное поведение вектора g в ходе процесса.

Глава 5

ЕСТЕСТВЕННО-КОНВЕКТИВНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ГЕОФИЗИЧЕСКОЙ ГИДРОДИНАМИКЕ

Исследования атмосферы и океана выдвигают ряд новых задач, в которых важную роль играют естественно-конвективные процессы. До недавнего времени возможности прямого численного моделирования таких процессов на основе уравнений Навье—Стокса казались весьма ограниченными в связи с их многомасштабностью и существенным влиянием различных неконтролируемых факторов. Продвижение в методах численного решения в настоящее время позволяет охватить в расчетах диапазон критериев подобия, соответствующих условиям лабораторных экспериментов, а также локальных естественно-конвективных процессов, имеющих масштаб от нескольких сантиметров до нескольких десятков и сотен метров. Это, например, движения, создающие тонкую структуру в толще океана, а также вертикальные движения в поверхностном слое, определяющие отвод тепла от поверхности и вынос (или, наоборот, заглубление) примесей [133].

Локальные естественно-конвективные движения — важнейший класс движений, возникающих при различных «сценариях» природных катастроф, в том числе вызываемых искусственно и связанных с выбросом в атмосферу или океан нагретых масс жидкости или газа, потоков лавы при извержениях и т. д. В моделях глобальной циркуляции, используемых для долгосрочного прогноза погоды, такие локально-конвективные движения обычно фильтруются, и учет их влияния представляет самостоятельную проблему.

В данной главе методы математического моделирования на основе уравнений Навье—Стокса применяются к геофизической гидродинамике. Рассмотрены две типичные задачи: задача о конвекции в устойчиво стратифицированной по солености жидкости при боковом потоке тепла (разд. 5.1) и задача о конвекции, возникающей в приповерхностном слое жидкости при охлаждении поверхности (разд. 5.2). Оба рассмотренных механизма конвекции универсальны и могут найти широкие технические и технологические применения. Весьма важным на этом этапе работ было преодоление методических и технических трудностей, а также проверка адекватности математических моделей и численных решений путем детального сопоставления с данными лабораторных экспериментов. Вместе с тем здесь получена информация о структуре движения, полях температуры, концентрации

примеси, границах режимов конвекции и ее развитии во времени, что в сочетании с экспериментальными данными значительно дополняет картину этих сложных процессов.

5.1. КОНВЕКЦИЯ И СЛОИСТЫЕ СТРУКТУРЫ В СТРАТИФИЦИРОВАННОЙ ЖИДКОСТИ

Зависимость плотности жидкости от температуры и концентрации может существенно влиять на характер конвективных процессов. Механизм термоконцентрационной конвекции не сводится к простому суммированию влияния каждой из компонент, а во многих случаях приводит к качественно новым явлениям, структурам, законам обмена.

Исследование процессов тепловой конвекции, как правило, включает анализ взаимного направления векторов силы тяжести и градиента температуры. Основные варианты подогрева — снизу, сбоку и сверху. Для термоконцентрационной конвекции возможно 10 вариантов (см., например, [128, 133]).

Другая специфическая особенность бинарной системы состоит в том, что коэффициенты диффузии тепла и соли в воде отличаются приблизительно в 100 раз и, как следствие, сильно различаются характерные времена диффузии тепла и соли.

Многообразие явлений, связанных с термоконцентрационной конвекцией, трудности выполнения лабораторных исследований, существенно нелинейный характер конвекции и другие причины объясняют относительно слабую изученность этих процессов.

Исследование термоконцентрационной конвекции, обусловленной воздействием нагревания или охлаждения на устойчиво стратифицированную по концентрации примеси жидкость, интенсивно ведется с середины 60-х годов. В лабораторных и натурных экспериментах [113, 168, 174] при быстром нагреве боковых стенок сосуда, содержащего устойчиво стратифицированную по концентрации жидкость, наблюдалось образование ячеистой, периодической по вертикали структуры течения, которое, в свою очередь, влияет на вертикальное распределение концентрации и температуры. В последующих работах было установлено, что высота ячеек связана с температурным напором и градиентом плотности [270]. В работе [224] сделана попытка объяснить эффект образования ячеек, исходя из линейной теории. Дальнейшие исследования были направлены как на изучение тех лабораторных условий, в которых могут образовываться ячеистые структуры (наклонная стенка, точечный и цилиндрический источник тепла и т. д.), так и на установление количественных связей между определяющими структуру факторами.

Интерес к изучению этого явления связан, в частности, с возможностью его использования для объяснения появления полосчатой структуры при выращивании монокристаллов, а также для объяснения обнаруженной в океане «тонкой структуры» [174],

проявляющейся в виде изрезанности вертикальных профилей температуры, солености и связанных с ними физических характеристик. Масштаб отдельных прослоек, согласно [168], составляет от одного метра до нескольких десятков метров.

Результаты лабораторных исследований позволяют дать следующее качественное описание механизма образования слоистых структур. Рассмотрим случай бокового нагрева некоторого объема стратифицированной жидкости. Прогрев жидкости за счет теплопроводности и связанное с ним изменение плотности ведут к возникновению подъемного движения вблизи стенки. Такой подъем осуществляется до высоты, на которой изменение плотности за счет прогрева, пропорциональное $\beta_r \Delta T$, становится равным изменению плотности за счет перепада концентрации солености $\beta_c (\partial c / \partial y)$. На этой высоте $h_0 = \beta_r \Delta T / \beta_c (\partial c / \partial y)$ происходит отток жидкости от стенки. Процесс формирования таких ячеек происходит более или менее одновременно вдоль всей нагретой стенки. При течении жидкости потеря тепла происходит быстрее, чем потеря соли, вследствие разных значений коэффициентов диффузии, и жидкость опускается примерно на исходный уровень, создавая замкнутую циркуляцию внутри каждой ячейки. Конвективное движение приводит к уменьшению градиента $\partial c / \partial y$ внутри ячеек и повышению его между ними.

Такое качественное описание согласуется с результатами экспериментов [168, 272], где получен размер ячеек $0,5 \leq h/h_0 \leq 0,9$. Однако многие детали, связанные, например, с конкретным описанием структуры, взаимодействием теплового и динамического пограничных слоев, влиянием коэффициентов диффузии, траекторий движения малых объемов жидкости, перестроением отдельных прослоек, требуют более точного количественного описания.

Теоретический анализ процесса образования слоистых структур при двойной диффузии был выполнен методами линейной теории устойчивости для бесконечного вертикального слоя и численными методами [208]. В этих расчетах расстояние между вертикальными стенками было порядка толщины прослойки, кроме того, ставились периодические условия по вертикали. Были получены решения с периодическими по вертикали ячейками, однако принятые ограничения не дают возможности провести количественное сравнение с экспериментальными результатами, полученными для бассейнов шириной $L \approx H$.

Рассмотрим, что происходит с элементом объема соленой воды при изменении его температуры на ΔT по отношению к температуре окружающей среды $T_0 = \text{const}$. Пусть, кроме того, стратификация, обусловленная концентрацией примеси, устойчива, постоянна во всем объеме и характеризуется градиентом солености $\partial c / \partial y$ или градиентом плотности $\beta_c (\partial c / \partial y)$.

Пренебрегая потерями тепла, следует ожидать, что элемент объема сместится в новое положение равновесия, которое находится от начального на расстоянии $\Delta y = h_0 = \beta_r \Delta T / \beta_c (\partial c / \partial y)$. На-

зовем это расстояние h_0 высотой плавучести. От соотношения между силами плавучести и силами вязкости зависит характер перехода в новое положение равновесия — монотонный или колебательный. Частота свободных колебаний около положения равновесия — частота плавучести $N = \gamma g \beta_c (\partial c / \partial y)$.

Лабораторные эксперименты [113, 208, 270] показывают, что нагревание вертикальной стенки лабораторного бассейна или внесение нагретого тела внутрь бассейна могут приводить к формированию специфической слоистой структуры течения, которая со временем преобразует исходный линейный профиль солености в ступенчатый. Далее основное внимание при математическом моделировании этого процесса уделяется анализу вертикального масштаба слоистой структуры.

5.1.1. Постановка задачи и параметры расчетов

Рассматривается плоская замкнутая область (рис. 5.1; $H=1$, $L=1, 2$) с подогреваемой (левой) стенкой лабораторного бассейна или внесение нагретого тела внутрь бассейна могут приводить к формированию специфической слоистой структуры течения, которая со временем преобразует исходный линейный профиль солености в ступенчатый. Далее основное внимание при математическом моделировании этого процесса уделяется анализу вертикального масштаба слоистой структуры.

Исследование процессов образования и развития слоистых структур в стратифицированной жидкости выполнено путем решения системы нестационарных уравнений конвекции в приближении Буссинеска (см. также разд. 1.1):

$$\omega_t + U\omega_x + V\omega_y = (\omega_{xx} + \omega_{yy}) - \text{Gr} \theta_x + \text{Gr}_c C_x, \quad (5.1)$$

$$\psi_{xx} + \psi_{yy} = \omega, \quad (5.2)$$

$$\theta_t + U\theta_x + V\theta_y = \text{Pr}^{-1} (\theta_{xx} + \theta_{yy}), \quad (5.3)$$

$$C_t + UC_x + VC_y = \text{Pr}_D^{-1} (C_{xx} + C_{yy}). \quad (5.4)$$

В качестве основной единицы масштаба длины используется высота H , так как предполагается, что горизонтальный размер существенно больше характерного масштаба структуры и в рассматриваемом диапазоне времени развитие структуры не влияет на полученные результаты. С другой стороны, неизвестен вертикальный масштаб структуры h , и при анализе результатов необходимо учитывать, что как при $h > H$, так и при $h \ll H$ слоистая структура не будет обнаружена. Это замечание относится и к лабораторным исследованиям, ограниченным определенным размером установки и чувствительностью приборов.

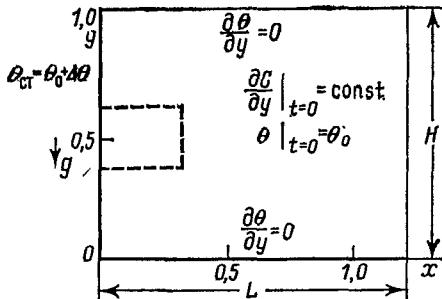


Рис. 5.1. Постановка задачи о расчете слоистых структур в стратифицированной жидкости

Структура течения в области, показанной пунктиром, представлена на рис 5.3

Безразмерными параметрами, определяющими режим образования слоистых структур, в данном случае являются числа Ra , Ra_c , Pr , Pr_D , определенные следующими выражениями:

$$\begin{aligned}\text{Ra} &= \text{Gr} \text{Pr} = g \beta_T H^3 \Delta T / \nu a, \quad \text{Pr} = \nu / a, \\ \text{Ra}_c &= \text{Gr}_c \text{Pr} = g \beta_c H^4 (\partial c / \partial y) / \nu a, \quad \text{Pr}_D = \nu / D.\end{aligned}\quad (5.5)$$

В расчетах использовались сетки из 129×129 и 65×65 узлов, равноотстоящих по вертикали и сгущающихся к нагретой стенке

Таблица 5.1. Параметры основных расчетов термоконцентрационной конвекции ($\text{Pr} = 7$, $\text{Pr}_D = 700$)

№ п/п	Ra	Ra_c	h_0	Ra_h	$\tau \cdot 10^6$	n_τ	$N \cdot 10^{-4}$	h_d	\bar{h}
1	$8,4 \cdot 10^9$	$7,7 \cdot 10^{10}$	0,11	$1,1 \cdot 10^7$	0,4	860	10	0,11	0,03
2	$3,4 \cdot 10^8$	$2,8 \cdot 10^9$	0,11	$4 \cdot 10^5$	1,6	1200	2,0	0,11	0,06
3	$8,4 \cdot 10^8$	$7,7 \cdot 10^8$	0,11	$1,1 \cdot 10^6$	1,6	1400	3,3	0,11	0,04
4	$8,4 \cdot 10^8$	$2,8 \cdot 10^8$	0,3	$2,3 \cdot 10^7$	1,6	700	2,0	0,3	0,09
5	$8,4 \cdot 10^8$	$5,6 \cdot 10^8$	0,15	$2,8 \cdot 10^6$	1,6	300	2,8	0,16	0,07
6	$7,0 \cdot 10^9$	$2,2 \cdot 10^{10}$	0,32	$2,2 \cdot 10^8$	1,6	300	5,5	0,31	0,04
7	$4,0 \cdot 10^{10}$	$2,2 \cdot 10^{11}$	0,18	$2,2 \cdot 10^8$	0,4	300	17	0,18	0,04
8	$2,8 \cdot 10^8$	$7,7 \cdot 10^8$	0,36	$1,4 \cdot 10^7$	1,6	300	1,1	0,35	0,09
9	$6,3 \cdot 10^8$	$3,2 \cdot 10^{10}$	0,2	$5 \cdot 10^7$	1,6	300	6,6	0,2	0,07
10	$9,0 \cdot 10^6$	$7,0 \cdot 10^7$	0,13	$2,2 \cdot 10^4$	6,4	1200	1,0	0,14	0,12
11	$2,8 \cdot 10^8$	$7,7 \cdot 10^8$	0,36	$1,4 \cdot 10^7$	6,4	300	1,1	0,34	0,1
12	$3,9 \cdot 10^5$	$7,0 \cdot 10^5$	0,56	$7 \cdot 10^4$	51	300	0,032	0,56	0,21
13	$1,3 \cdot 10^7$	$7,0 \cdot 10^7$	0,18	$7,1 \cdot 10^4$	6,4	300	0,32	0,2	0,11
14	$2,2 \cdot 10^7$	$7,0 \cdot 10^7$	0,32	$7 \cdot 10^5$	13	300	0,32	0,31	0,14
15	$1,7 \cdot 10^8$	$7,0 \cdot 10^8$	0,24	$2,2 \cdot 10^6$	6,4	300	1,0	0,23	0,1
16	$1,3 \cdot 10^9$	$7,0 \cdot 10^9$	0,18	$7 \cdot 10^6$	3,2	150	3,2	0,17	0,07
17	$3,0 \cdot 10^6$	$7,0 \cdot 10^6$	0,42	$2,2 \cdot 10^5$	26	300	0,1	0,42	0,22
18	$8,4 \cdot 10^7$	$7,7 \cdot 10^8$	0,11	$1,1 \cdot 10^5$	13	250	1,1	0,12	0,06
19	$1,7 \cdot 10^8$	$7,0 \cdot 10^8$	0,24	$3,2 \cdot 10^5$	6,4	1500	1,0	—	0,1

Примечание. Расчеты 1—9 выполнены на сетке 129×129 , 10—19 — на сетке 65×65 . В последнем расчете температура нагретой стенки линейно растет с высотой

но горизонтали. Минимальный шаг сеток составлял соответственно 0,003 и 0,01. На рис. 5.1 дано расположение расчетных узлов сетки 129×129 и выделена часть области, изображенная далее в увеличенном виде на ряде рисунков. (Эта часть области, примыкающая к нагретой стенке на высоте от $\frac{3}{8}H$ до $\frac{5}{8}H$, в дальнейшем называется «центральной».)

В табл. 5.1 приведены сведения о расчетах задачи, параметры которой соответствовали диапазону образования слоистых структур. Помимо чисел Рэлея и сеточных параметров (сетка, шаг по времени τ и количество таких шагов n_τ), даны также: безразмерная высота плавучести h_0 и число Рэлея Ra_h , рассчитанное по этой высоте; безразмерная частота плавучести N ; высота придонной ячейки h_d и средняя высота прослоек \bar{h} на начальной стадии развития. Для перехода к размерным величинам необходимо задать высоту H , вязкость ν , dc/dy , ΔT .

5.1.2. Развитие термоконцентрационной конвекции во времени и характерные пространственные структуры

В процессе образования слоистой структуры можно выделить несколько характерных периодов, определяемых по структурам движения и полям температуры и концентрации. Как показывают выполненные расчеты, в исследованном диапазоне параметров Ra , Ra_c при варьировании начальных и граничных условий основные закономерности образования слоистых структур (при боковом подогреве) устойчиво воспроизводятся, хотя длительность отдельных периодов может меняться.

Рассмотрим развитие термоконцентрационной конвекции для безразмерных параметров $Ra = 8,4 \cdot 10^8$, $Ra_c = 7,7 \cdot 10^9$, $Pr = 7$, $Pr_b = 700$, отвечающих условиям одного из экспериментов [113]. В этом подразделе мы приводим результаты численного расчета и их сопоставления с экспериментальными данными.

На начальной стадии развития процесса вдоль нагретой стени формируется подъемное движение жидкости. Максимальной скорости это движение достигает в придонной части области, где вследствие условий изоляции нижней границы возникает зона пониженной стратификации. В средней по высоте части, вблизи нагреваемой стени, максимальная безразмерная вертикальная скорость доходит до 150—200. При такой скорости и использованном шаге по времени $\tau = 1,6 \cdot 10^{-5}$ потребовалось бы около 10^3 шагов для того, чтобы частица жидкости прошла путь, равный высоте бассейна. Однако избыточная соленость, связанная с наличием стратификации, при движении жидкости вверх уменьшает подъемную силу. Высота подъема элемента жидкости (высота плавучести) при условии равенства его температуры температуре стени равна

$$h_0 = \beta_T \Delta T / \beta_c (dc/dy) = Ra/Ra_c \approx 0,11.$$

На рис. 5.2 приведены изолинии функции тока и изотермы для $Fo = 3,2 \cdot 10^{-3}$, $4,8 \cdot 10^{-3}$, $6,4 \cdot 10^{-3}$ для всей расчетной области. Выделены следующие стадии развития конвекции:

- 1) формирование придонной циркуляционной структуры ($Fo/\tau \leq 100$);
- 2) образование серии ячеек в придонной и приповерхностной областях ($100 \leq Fo/\tau \leq 300$);
- 3) образование ячеек в центральной части области ($300 \leq Fo/\tau \leq 350$);
- 4) формирование ступенчатого профиля солености в зоне ячеек и их укрупнение (слияние отдельных ячеек с изменением вертикального размера прослоек ($300 \leq Fo/\tau \leq 1000$));

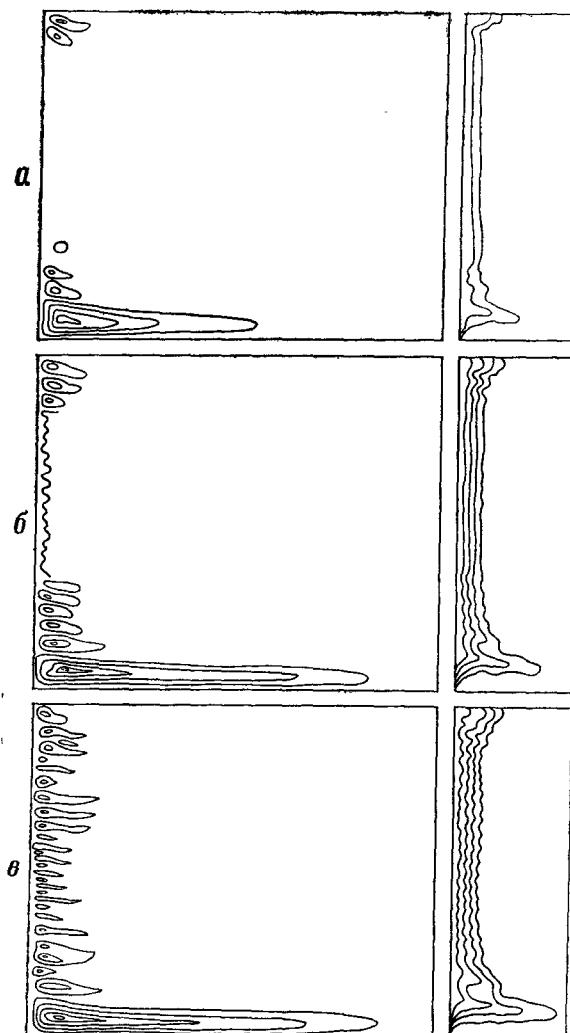


Рис. 5.2.
Формирование
конвективных ячеек
при $Ra = 8,4 \cdot 10^9$,
 $Ra_c = 7,7 \cdot 10^9$,
 $Ra_h = 1,09 \cdot 10^6$,
 $h_0 = 0,11$

Слева — линии тока,
справа — изотермы.
а — $Fo = 3,2 \cdot 10^{-3}$;
б — $4,8 \cdot 10^{-3}$;
в — $6,4 \cdot 10^{-3}$

5) удлинение ячеек в горизонтальном направлении при сохранении постоянного вертикального размера ($Fo/\tau > 1000$) — режим развитой конвекции.

В данном разделе основное внимание уделяется трем последним стадиям развития конвекции. На рис. 5.3 приведены изолинии $\psi = \text{const}$ и $\theta = \text{const}$ для различных моментов времени $320 \leqslant Fo/\tau \leqslant 350$ в центральной по высоте части области. В этой части при $Fo/\tau \leqslant 300$ температурный фронт практически плоский, а горизонтальная составляющая скорости гораздо меньше вертикальной. Вблизи высоты $y=0,5$ ячейки формируются раньше, чем на прилежащих участках, что связано с несколько большей скоростью подъемного движения на этой высоте. Однако эта неравномерность заметна в течение незначительного промежутка времени $Fo/\tau \approx 10 \div 20$, и формирование ячеек в рассматриваемой области можно считать одновременным.

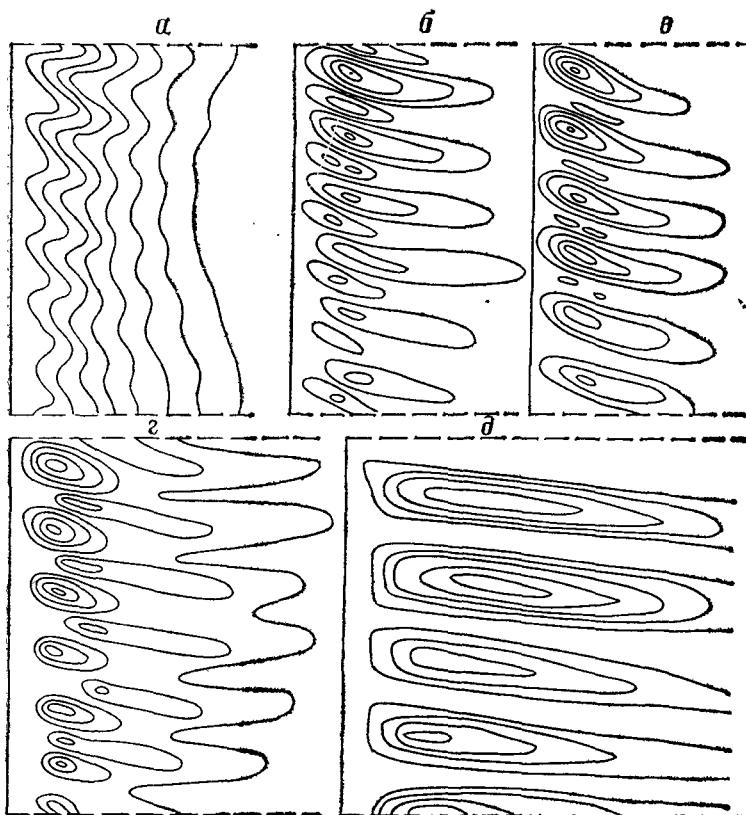


Рис. 5.3. Структура течения в различные моменты времени в части расчетной области, выделенной на рис. 5.1

$Ra_h = 1,09 \cdot 10^6$, $h_0 = 0,11$, безразмерное время Fo равно $0,00512(a)$, $0,00528(b)$, $0,00560(c)$, $0,00688(e)$ и $0,02720(\delta)$. Основные элементы развития ячеистой структуры совпадают с экспериментальными данными

По картинам линий тока видно, как появление горизонтальной составляющей скорости (рис. 5.3, а), связанное с оттоком жидкости от стенки, приводит к замкнутой циркуляции, причем в течение короткого промежутка времени существует согласованная система ячеек, в которых циркуляция направлена как по часовой стрелке, так и против. Однако увеличение скорости движения происходит только для первого типа ячеек (в них движение в пристеночной области направлено вверх). Ячейки, в которых движение происходит против часовой стрелки, оттесняются от стенки, и интенсивность движения в них падает (рис. 5.3, б). В дальнейшем такие согласующие ячейки хотя и не исчезают полностью, но в связи с малой интенсивностью движения (скорости в них на порядок ниже, чем в основных) они практически не видны.

Формирование регулярной промежуточной структуры в основном заканчивается к моменту времени $Fo/\tau \approx 350 \div 400$. Расстояние между ячейками составляет (при использованных в данном случае безразмерных параметрах) $\sim 1/20$. В придонной и приповерхностной областях структура менее регулярна, а в центральной части ($0,25 \leq y \leq 0,8$) распределения температуры, солености и скорости имеют хорошо выраженную периодичность.

На рис. 5.4, а, б показано изменение вертикального распределения температуры для $Fo/\tau = 330$ и 1170. Для каждого момента времени приведено по 5 профилей на расстояниях (слева направо) соответственно 0,028; 0,064; 0,106; 0,156; 0,216 от горячей стенки. Движение нагретой жидкости от стенки происходит не в горизонтальном направлении — высота экстремумов понижается с удалением от стенки. Регулярное распределение $\Theta(y)$ (в центральной части) становится с течением времени менее регулярным, отдельные максимумы (ячейки) сливаются, причем перестроение профиля происходит почти одновременно вдоль всей ячейки.

На передней границе теплового фронта, т. е. дальше от стенки, оказывается влияние на профиль оттекающего от стенки нагретого потока. При этом распределение температуры вблизи этой границы не имеет таких больших градиентов, как вблизи нагретой стенки. Асимметрия вертикального профиля температуры объясняется тем, что уменьшение температуры происходит внутри ячеек, а повышение — на границах между ячейками, где из-за отсутствия конвективного переноса градиент температуры выравнивается только диффузионным путем. Гораздо резче асимметрия профиля внутри и вне ячеек выражена для распределения солености.

Рассмотрим изменение температуры в горизонтальном направлении (рис. 5.5). Конвективная ячейка ориентирована под некоторым углом к горизонту, поэтому горизонтальные сечения проходят через одну или две соседние ячейки под некоторым углом к оси. С этим связано, в частности, наличие на некоторых графиках двух областей перемешивания, а также то, что поло-

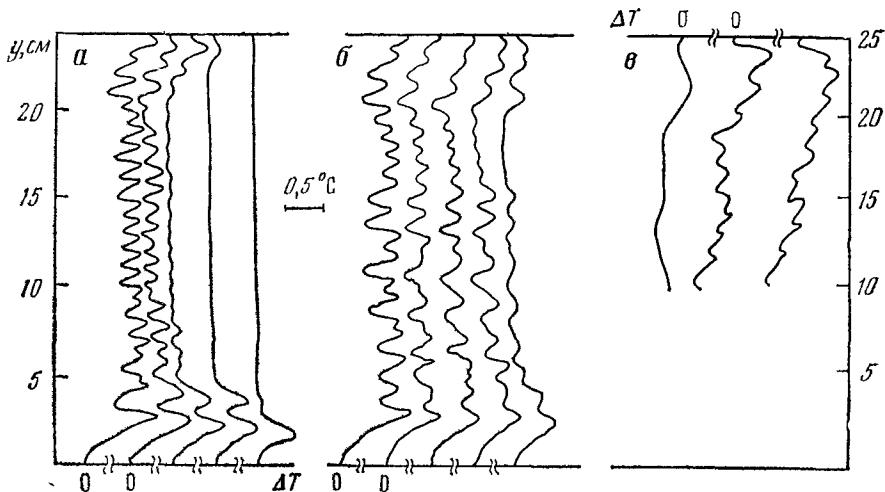


Рис. 5.4. Изменение вертикального профиля температуры со временем в фиксированных сечениях области

a, б — расчет при $t=6$ мин и 20 мин соответственно;
в — эксперимент [113]

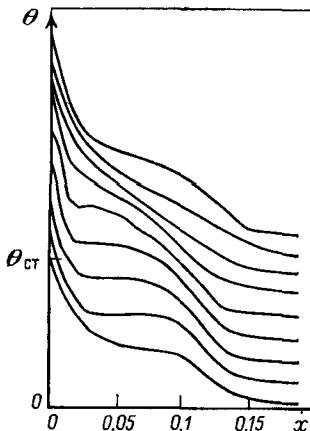


Рис. 5.5. Горизонтальные профили температуры в отдельной конвективной ячейке

жения зон повышенных градиентов температуры, солености, скорости, связанных с границей ячейки, для разных сечений либо в разные моменты времени могут сильно различаться. В развитой ячеистой структуре после формирования температурного пологого слоя вблизи стенки профиль температуры близок к линейному. Поток тепла медленно уменьшается со временем, причем локальное распределение потока тепла вдоль стенки имеет немонотонный характер в соответствии с приведенными на рис. 5.4 вертикальными профилями температуры. Конвективное движение в ячейках приводит к выравниванию температуры по горизонтали по границам ячеек; вдали от стенки температура падает по экспоненте.

На рис. 5.5 можно выделить те же три зоны изменения солености. пристеночную, зону ячеек, невозмущенную зону. Максимальное значение вертикальной составляющей скорости в этом режиме мало меняется по времени и составляет 50—100, что для $H=25$ см примерно равно 0,02—0,04 см/с.

5.1.3. Влияние теплового и концентрационного чисел Рэлея на образование и эволюцию слоистых структур

Рассмотрим влияние Ra и Ra_c на термоконцентрационную конвекцию при фиксированном $h_0 = Ra/Ra_c = 0,11$.

При числах Ra , $Ra_c = 10^3 \div 10^4$ скорость движения близка к скорости диффузии тепла (за исключением придонной области), и изменение плотности за счет нагрева полностью компенсируется перераспределением концентрации соли. Максимальное значение скорости $V \approx 1$ достигается к моменту времени $t = T_n/2$, затем происходит ее монотонное убывание. Положение максимума скорости смещается от стенки в глубь жидкости вместе с температурной волной, фронт которой в центральной части области остается плоским. Уровни равной плотности при $t > T_n$ становятся практически горизонтальными и ячеистая структура не реализуется.

При Ra , $Ra_c = 10^5 \div 10^6$ изменение скорости после достижения максимального значения 1—10 происходит немонотонно: уменьшение скорости сопровождается колебаниями с периодом (1—1,5) T_n . Максимальное значение скорости, как и при более низких числах Рэлея, достигается при $t = 0,5 T_n$. Интересно отметить, что при $Ra = 10^7$ на переходном участке появляются некоторые горизонтальные движения с вертикальным периодом, близким к h_0 . Однако скорость этого движения пренебрежимо мала, и заметного искажения температурного фронта оно не вызывает. Вертикальный градиент концентрации dc/dy в центральной по высоте части пристеночной области также остается постоянным и равным исходному, хотя сама концентрация и возросла.

При дальнейшем увеличении числа Ra (и соответственно скорости движения) важную роль в развитии конвективного движения начинает играть вязкость. В связи с важностью этого вопроса для дальнейшего изложения рассмотрим этот процесс подробнее.

Прогрев жидкости создает подъемную силу, которая принимает максимальное значение в области максимального горизонтального градиента температуры, т. е. в начальный момент времени непосредственно у стенки. Однако прилипание — наличие вязкого подслоя — приводит к тому, что максимальное значение скорости имеет на некотором расстоянии от стенки, т. е. в зоне, где температура ниже θ_{ct} . Поскольку движение на начальной стадии происходит вертикально и практически вдоль изотермы, высота подъема жидкости в зоне максимальной

скорости определяется соотношением

$$h = \frac{\beta_T (T_1 - T_0)}{\beta_c (\partial c / \partial y)},$$

где T_1 — температура жидкости в зоне максимальной скорости; T_0 — температура окружающей среды. Эта высота всегда меньше h_0 и должна уменьшаться с увеличением Ra .

Этот эффект, связанный с наличием вязкого подслоя, может в значительной степени зависеть от вязкости (и числа Прандтля) и условий прилипания — шероховатости поверхности, однородности температуры стенки, постоянства градиента концентрации соли и т. д. Другим следствием влияния вязкости, не связанным с наличием твердой поверхности, является вовлечение в подъемное движение слабо нагретой жидкости, находящейся дальше от стенки, чем зона основного подъема. Этот процесс приводит к формированию зоны избыточной плотности и способствует образованию ячеистой структуры движения.

Для определения влияния Ra_h на развитие ячеек рассмотрим вариант расчета, в котором Ra и Ra_c изменены таким образом, чтобы сохранилось $h_0 = 0,11$ ($Ra = 3,1 \cdot 10^8$, $Ra_c = 2,8 \cdot 10^9$, что соответствует $Ra_h = 3,95 \cdot 10^5$). Сравнение этого варианта с приведенными выше результатами для $Ra_h = 1,09 \cdot 10^6$ показывает, что уменьшение Ra_h приводит к формированию более регулярной структуры; высота придонной ячейки в обоих случаях равна h_0 . Вертикальный размер ячеек (кроме придонной) с ростом Ra , уменьшается, причем структура течения становится, как уже отмечалось, менее регулярной. Придонная ячейка имеет максимальный размер, который совпадает с величиной h_0 с точностью не хуже 5%.

Границы (размер) придонной ячейки наиболее точно можно определить по вертикальным профилям солености — на границе ячейки этот профиль имеет резкий излом, как показано на рис. 5.6, где придонная часть профиля солености на расстоянии 0,02—0,03 от нагретой стенки приведена для различных вариантов Ra , Ra_c . Размер остальных ячеек в диапазоне $Ra_h = 10^5 \div 10^7$ всегда меньше h_0 , так как температура в зоне максимальной скорости для всех рассчитанных вариантов находится в диапазоне (0,2—0,5) θ_{ct} , где θ_{ct} — температура стенки.

При $Ra_h > 10^8$ быстрый переход через стадию существования регулярной структуры с хорошо выраженной периодичностью и подобием ячеек связан с неравномерностью скорости роста этих ячеек и усилением их взаимного влияния. Распределения полей температуры и скорости при этом сходны с элементами структуры пристеночного слоя при тепловой конвекции. При числе $Ra_h > 10^7$ интенсивность переноса тепла и скорость движения в пристеночной области столь велики, что тепловые эффекты являются преобладающими, и соленость в этой области ведет себя как пассивная примесь. В этом случае появляется состав-

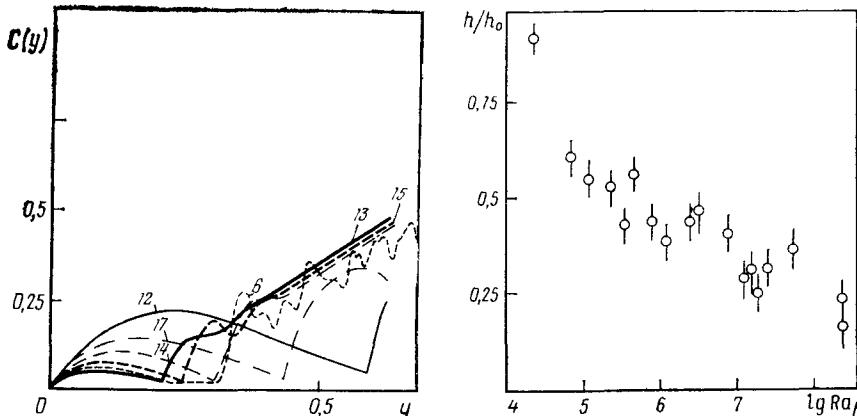


Рис. 5.6. Вертикальный профиль солености в придонной области

Номера профилей соответствуют номеру строки в табл. 51

Рис. 5.7. Зависимость относительного масштаба слоистой структуры от Ra_h

Дана средняя погрешность определения h/h_0 для $h_0=0,1$

ляющая переноса массы вдоль всей поверхности, границы между ячейками разрушаются.

При $Ra_h > 10^8$ регулярная структура в пристеночной области существует незначительное время: $\Delta t < 10^{-5}$; при ее разрушении возникает периодическая структура со значительно большим вертикальным масштабом (масштаб возрастает в 3–5 раз при $Ra_h = 10^8 \div 10^9$). При этом пристеночная область выступает как своего рода «фиктивная» стенка; новая регулярная структура возникает вдали от стенки, на расстоянии, близком к вертикальному масштабу этой структуры. Количественное исследование этого режима в данной работе не выполнялось.

Рассмотрим приведенную на рис. 5.7 зависимость вертикального размера ячеек, отнесенного к высоте плавучести, от числа Ra_h для момента времени, соответствующего формированию периодической структуры. При малых числах Рэлея $Ra_h \approx 10^4$ (напомним, что при $Ra_h \leq 10^4$ слоистая структура не образуется) размер ячеек близок к высоте плавучести. Относительный размер 0,6, который получен в экспериментах [113], соответствует $Ra_h \approx 10^5$. Дальнейшее увеличение Ra_h ведет к уменьшению отношения h/h_0 . Относительно большая погрешность приведенных результатов связана со следующими причинами: различием в размере ячеек, неодновременностью их формирования, быстрым изменением начального размера при больших Ra_h . Однако общая тенденция к уменьшению h/h_0 с ростом Ra_h подтверждается, в частности, экспериментальными данными [247].

Приведенные результаты показывают, что эмпирическая зависимость $h = c\Delta T$ не имеет места, если рассматривать весь ди-

пазон $10^4 < Ra_h < 10^8$. Ниже описан другой подход к анализу вертикального масштаба слоистой структуры, не связывающий непосредственно этот масштаб с высотой плавучести.

5.1.4. Режимы конвекции и вертикальный масштаб слоистой структуры

Результаты численного моделирования позволяют установить некоторые общие закономерности образования слоистых структур в условиях устойчивой стратификации по солености. Хотя непосредственная область применения этих результатов связана с конкретной задачей, они могут служить основой для дальнейших теоретических и экспериментальных исследований.

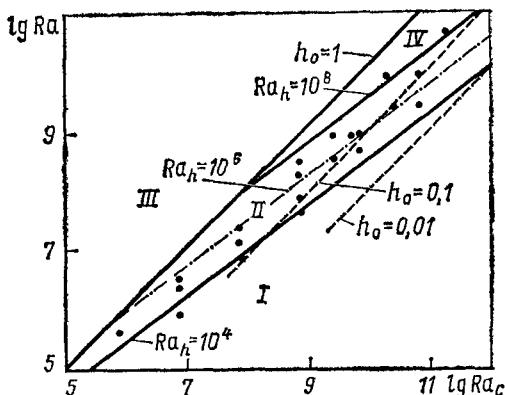
В зависимости от соотношения сил плавучести, обусловленных изменением температуры (Ra) и стратификацией (Ra_c) жидкости, можно выделить четыре области режимов тепломассообмена (рис. 5.8): I — режим теплопроводности, II — режим слоистых структур, III — режим тепловой конвекции, IV — режим турбулентной термоконцентрационной конвекции.

В режиме теплопроводности конвективное движение существует, так как имеется горизонтальный градиент температуры. Скорость этого движения мала, и горизонтальное распределение (изменение) этой скорости соответствует градиенту температуры. Иначе говоря, уменьшение плотности за счет нагревания компенсируется подъемом более соленой жидкости с нижнего горизонта, причем подъем осуществляется монотонно, с сохранением линейного распределения солености вдали от горизонтальных границ. Граница этого режима определяется числом Ra_h , критическое значение которого находится в диапазоне $(0,5 \div 1,5) \cdot 10^4$.

Режим слоистых структур подробно описан выше. Рассмотрим рис. 5.8 с точки зрения предсказания размеров ячеек в экспериментах и численных расчетах, в которых величины Ra и Ra_c известны. Зафиксируем значение Ra_c (для определенности $Ra_c = 10^9$) и будем увеличивать число Ra , т. е. температуру стенки.

Рис. 5.8. Классификация режимов конвекции в зависимости от величины устойчивой стратификации по концентрации примеси Ra_c и горизонтального перепада температуры Ra

Точками отмечены параметры, при которых выполнены расчеты; $h_0 = Ra/Ra_c$ — безразмерная высота плавучести, $Ra_h = Ra^4/Ra_c^3$ — модифицированное число Рэлея



Вплоть до значений $Ra \approx 5 \cdot 10^7$ реализуется режим теплопроводности. Дальнейшее увеличение Ra приводит к формированию ячеек, размер которых может быть определен из рис. 5.8 и 5.7, на первом из которых нанесены значения Ra_h и h_0 , а на втором показана полученная по данным расчетов зависимость относительного размера образующихся ячеек от Ra_h . В рассматриваемом случае образование ячеек начнется при $h_0 = 0,07$ (высота бассейна). Дальнейшее увеличение температуры приводит к изменению Ra и h : высота плавучести увеличивается, но из-за увеличения Ra_h фактический размер ячеек по отношению к высоте плавучести уменьшается.

В третьем режиме преобладает влияние тепловой конвекции; соленоность выступает как пассивная примесь, практически не влияя на плотность жидкости. Для анализа этого решения за основу можно взять результаты исследований тепловой конвекции (см., например, гл. 3).

Для турбулентной термоконцентрационной конвекции существенно влияние и температуры, и солености. Этот режим в большей степени, чем другие, зависит от граничных условий, от способа подвода тепла к исследуемому объему, от постоянства градиента солености и др. В настоящее время имеются качественные данные об этом режиме, причем для случая турбулентности, локализованной вблизи нагревателя.

Вернемся к анализу характерного вертикального масштаба слоистой структуры. Для естественных океанических условий характерен существенно больший вертикальный масштаб, чем для лабораторных экспериментов [168, 174], меньшая стратификация ($N = 10^{-2} \div 10^{-3} \text{ с}^{-1}$) и значительная неоднородность температурного поля, что затрудняет определение высоты плавучести и числа Рэлея. Вместе с тем результаты численных экспериментов и некоторые лабораторные данные [113, 247] дают основание считать относительно устойчивым размер ячеек, близкий к минимально возможному при данной стратификации.

Предположим, что при фиксированной стратификации происходит постепенный прогрев объема жидкости. Формирование ячеек начнется при превышении критического числа Рэлея:

$$Ra_h^* = \frac{g\beta_T \Delta T^* (h^*)^3}{va} = \frac{g\beta_c (\partial C / \partial z) (h^*)^4}{va} \approx 10^1.$$

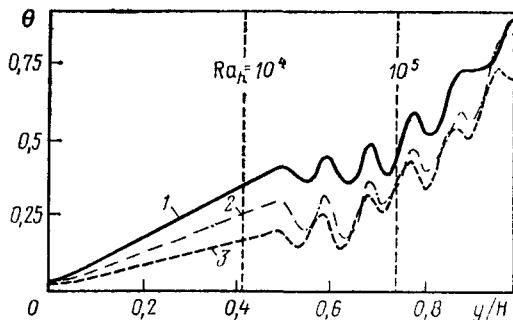
Дальнейший прогрев меняет высоту плавучести, но в условиях уже сформировавшейся структуры течения не может вызвать быстрого изменения ее масштаба, который может быть выражен как

$$h^* \approx \left[\frac{va}{10^4 g \beta_c (\partial C / \partial z)} \right]^{1/4} = \frac{\sqrt[4]{va}}{10 \sqrt[4]{N}}. \quad (5.6)$$

Рассмотрим результаты специального численного эксперимента, в котором в отличие от условий основной серии расчетов

Рис. 5.9. Вертикальные распределения температуры в жидкости на различных расстояниях от стенки, температура которой меняется с высотой ($T_{ст} = y/H$)

$Fo = 0,038$;
 x/H равно:
 1 — 0,05;
 2 — 0,1;
 3 — 0,16



на левой нагретой стенке температура линейно возрастает с высотой вдоль стенки ($\theta_{ст} = y$). Высоты y_1 , y_2 , соответствующие $Ra_h = 10^4$, 10^5 , показаны на рис. 5.9, где даны распределения температуры по вертикали. Анализ результатов расчета показывает, что происходит формирование ячеек приблизительно одного размера. Придонная ячейка, естественно, в такой постановке не реализуется.

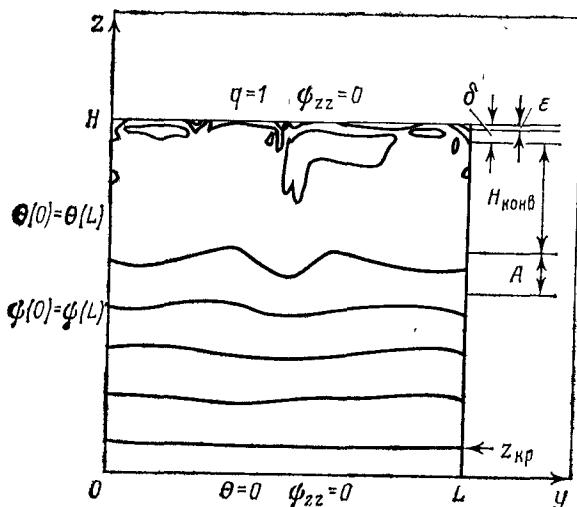
Численный эксперимент, в котором температура стенки была постоянна по высоте, а стратификация $\partial C / \partial y$ менялась линейно с высотой, показал, что и в этом случае размер ячеек приблизительно одинаков. Можно предполагать, что фактический размер ячеек связан не с высотой плавучести $h_0 = \beta_t \Delta T / \beta_c (\partial C / \partial y)$, а с «критической» высотой плавучести, соответствующей критическому числу $Ra_h \approx 10^4$. Увеличение размера ячеек относительно h^* наблюдается при интенсивном подводе тепла и в природных условиях, где, по-видимому, существенное влияние оказывает естественная турбулентность. Использование турбулентных (эффективных) коэффициентов вязкости и температуропроводности ведет к увеличению h^* .

5.2. КОНВЕКЦИЯ И ВНУТРЕННИЕ ВОЛНЫ В ПРИПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ ЖИДКОСТИ

5.2.1. Постановка задачи

В настоящем разделе рассмотрена задача о конвективном тепломассообмене вблизи поверхности жидкости, вызванном охлаждением поверхности сверху. В качестве математической модели здесь, как и в разд. 5.1, используется двумерная система уравнений конвекции вязкой несжимаемой жидкости (1.4) на основе уравнений Навье—Стокса в приближении Буссинеска. Другие подходы в решении этой проблемы можно найти в работах [19, 29, 52, 53, 78, 83, 93, 116, 152, 175, 187, 217, 233, 235].

Расчетная схема приведена на рис. 5.10. В результате охлаждения поверхности жидкости создается поверхностный слой более холодной и, следовательно, более тяжелой жидкости, который



Показаны изолинии температуры.

Зона

ϵ — «холодная пленка»,

δ — температурный пограничный слой,

$H_{конв}$ — область интенсивной конвекции,

A — внутренние волны на верхней границе стратифицированного объема,

кр — критическая глубина проникновения внутренних волн

Рис. 5.10. Постановка задачи о конвекции при охлаждении поверхности глубокого устойчиво стратифицированного слоя жидкости

теряет устойчивость и проникает вглубь, разрушая первоначальную устойчивую стратификацию. При этом у поверхности образуются характерные конвективные элементы — термики, которые можно наблюдать теневыми методами [79]. Образование термиков при равномерном охлаждении поверхности, связанное с конвективной неустойчивостью, — одна из особенностей данной задачи по сравнению со случаем образования термиков от локального источника [5, 68, 223]. Вертикальный перенос тепла и массы термиками, сопровождаемый разрушением устойчивой стратификации и генерацией внутренних волн, — универсальный механизм, имеющий широкое распространение.

В лабораторных экспериментах [37, 49, 175] по изучению теплообмена вблизи поверхности подтверждаются представления о конвекции как об основном физическом механизме, формирующем тонкую структуру поля температуры в естественных условиях [161, 180]. При изучении охлаждения поверхности водоема на основе математической модели (1.4) не будем учитывать ряд физических процессов — солнечный прогрев, осолонение вследствие испарения, опреснение из-за осадков, влияние волн и другие процессы, характерные для приповерхностного слоя океана [173]. Экспериментально установлено, что критерий устойчивости (критическое число Рэлея Ra^*), термическая структура пограничного слоя и зависимость его охлаждения от теплового потока через границу раздела вода—воздух для морской и пресной воды в диапазоне температуры 20—30° С практически совпадают [173]. Известно [186, 219, 267], что при потоках тепла меньше 200 Вт/м² конвективные элементы (термики) имеют

форму двумерных слоев, у которых один поперечный размер много больше другого. Вихри, имеющие существенно трехмерный характер [186], образуются только в местах пересечения двух термиков, что наряду с другими упомянутыми выше особенностями позволяет ограничиться двумерной математической моделью конвекции в задаче об охлаждении поверхности воды.

Основные отличия задач, рассматриваемых ниже, от классической задачи Рэлея—Бенара о конвекции в слое жидкости [41, 232] следующие:

- 1) переменная глубина слоя, охваченного конвекцией; глубина растет по мере охлаждения;
- 2) конвективные элементы принимают форму как валов, так и двумерных «слоев», имеющих в сечении форму «гриба» или термика;
- 3) профиль температуры по глубине существенно изменяется со временем (рассмотрен случай первоначально стратифицированного по температуре слоя);
- 4) граничные условия на боковых стенках и дне расчетной области отличаются от классических.

Эти отличия приводят к новым особенностям конвекции при охлаждении глубокого слоя [248, 268, 276], таким, как, например, наличие различных зон по глубине слоя, эффект возникновения внутренних волн и их воздействия на конвекцию вблизи поверхности (см. п. 5.2.3).

Для рассматриваемых здесь задач характерна существенная нестационарность процесса конвективного тепломассообмена, что затрудняет не только расчет, но и обработку данных численного моделирования. Для ускорения процедуры обработки и повышения ее качества использовалась проблемно-ориентированная графическая система «Буэр» (см. п. 2.2.2, 6.5.2).

5.2.2. Перемешивание тяжелой и легкой жидкости после внезапного обрушения

Упрощенной моделью конвекции в приповерхностном слое может служить обрушение более тяжелого слоя воды в квазидвумерной ячейке, исследованное в [24]. В герметично закрытой ячейке $120 \times 60 \times 2,2$ см создавалась двухслойная устойчивая стратификация из соленой и пресной воды. Затем ячейка быстро переворачивалась, стратификация становилась неустойчивой, и процесс обрушения фиксировался на кинопленку.

В математической модели рассматривается двумерное изотермическое движение жидкости в прямоугольной области. Исходная система уравнений конвекции имеет вид (см. также разд. 1.4)

$$\omega_t + U\omega_z + V\omega_y = \omega_{zz} + \omega_{yy} + \text{Gr}_c C_z, \quad (5.7)$$

$$\Psi_{zz} + \Psi_{yy} = -\omega, \quad (5.8)$$

$$C_t + UC_z + VC_y = \frac{1}{Sc} (C_{zz} + C_{yy}). \quad (5.9)$$

Здесь переменные ω , ψ , U , V , C имеют тот же смысл, что и в гл. 1. На всех границах расчетной области ставились условия прилипания $U=0$, $V=0$ и отсутствия потоков соли $\partial C/\partial n=0$.

Трение о боковые стенки, через которые производилась киносъемка, в математической модели (5.7)–(5.9) не учитывается. Для квазидвумерного течения при толщине ячейки 2,2 см это справедливо. В обзоре [40] рассмотрена аналогичная задача при толщине ячейки 0,01–0,08 см (ячейка Хеле–Шоу). В этом случае течение строго двумерное, а в уравнении Навье–Стокса появляется дополнительный член $-12vv/d^2$, где d — толщина ячейки, v — вязкость, v — скорость течения.

По молекулярным коэффициентам переноса, полной глубине жидкости $H=60$ см и начальной солености тяжелого слоя жидкости $c_0=5\%$; $0,4\%$ определялись параметры задачи — диффузионное число Грасгофа $Gr_c=g\beta_c H^3 \Delta c_0/v^2=8 \cdot 10^9$; $6 \cdot 10^8$ и число Шмидта $Sc=v/D=800$. Расчеты выполнены по основной конечно-разностной схеме (1.13), реализованной в виде комплекса программ метода конечных разностей (см. разд. 6.1). Для решения уравнения Пуассона в варианте с неравномерной сеткой 65×65 применялся итерационный метод с оптимальным выбором параметров, а в варианте с равномерной сеткой 129×130 — метод БПФ. Минимальный шаг разностной сетки равнялся $h_i=6$ мм. Во всех случаях в начальный момент поле скорости было нулевым, т. е. движения полностью отсутствовали.

Сопоставление эксперимента и расчета в этой задаче имеет свои особенности. Во-первых, в начальный момент в эксперименте [24] имеются неконтролируемые волновые возмущения границы раздела соленой и пресной воды. Во-вторых, начальная стадия потери устойчивости тяжелого слоя имеет трехмерный характер. Ширина бассейна $d=2,2$ см достаточна для развития трехмерных солевых «термиков» на начальном этапе. Согласно предсказаниям теории [207], длина волны наиболее неустойчивой моды в данном случае равна $\lambda_0 \approx 0,64$ мм. На фотографиях эксперимента в начальный момент действительно видны «термики» такого масштаба. Таким образом, очевидно, что начальные стадии развития неустойчивости Рэлея—Тейлора не могут быть воспроизведены в численном расчете по модели (5.7)–(5.9) в силу двумерности модели, крупного шага конечно-разностной сетки $h_i \gg \lambda_0$ и неизвестных начальных возмущений скорости¹.

Тем не менее в расчетах по модели (5.7)–(5.9) развитие неустойчивости также имеет место, хотя на начальном этапе на этот процесс сильное влияние оказывает шаг разностной сетки h_i и наличие (или отсутствие) затравочных возмущений на границе раздела тяжелая—легкая жидкость. Если затравочные возмущения на границе раздела не вносятся, то должно пройти довольно значительное время (163 с в расчете с $c_0=0,4\%$), прежде чем

¹ В этой связи отметим работы [12, 39], где сообщается о трехмерном расчете начальной стадии развития неустойчивости Рэлея—Тейлора. Стадия турбулентного перемешивания рассматривалась в работах [4, 115].

«машинные возмущения», т. е. ошибки округления в младших разрядах, выведут систему из неустойчивого равновесия. При прочих равных условиях чем точнее расчет (например, расчет с удвоенной длиной машинного слова), тем больше требуется времени для накопления «машинных возмущений». В другом расчете (с $c_0=5\%$) было задано возмущение границы раздела тяжелой и легкой жидкости в виде чередования значений концентрации соли на границе раздела в «шахматном» порядке, так что в соседних узлах конечно-разностной сетки были значения $c_0=5\%$ и $c_0=0$, что соответствует возмущениям с минимальной для данной конечно-разностной сетки длиной волны. Этого оказалось достаточно, чтобы время развития начального этапа неустойчивости уменьшилось со 163 до 15 с.

В эксперименте [24] начальная стадия развития неустойчивости длится около 10 с и зафиксирована только на первой фотографии (см. рис. 1 из [24]). Процесс роста соленоидных «термиков» и сокращения их числа в начале стадии перемешивания имеет трехмерный характер, и только к моменту времени 20 с, когда размеры «термиков» значительно превосходят ширину бассейна (2,2 см), наступает двумерный режим.

Предыстория двумерного режима течения, таким образом, в эксперименте и расчете совершенно различна. В этом основная особенность данной задачи, которую необходимо учитывать при сопоставлении результатов расчета и эксперимента.

По фотографиям эксперимента и по рассчитанным изолиниям соленоидности (плотности) определялась средняя глубина проникно-

вания конвективных элементов $\bar{h} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N h_k$, где N — общее

число «термиков», h_k — глубина проникновения k -го «термика». Зависимость средней глубины проникновения от времени представлена на рис. 5.11. Для расчета с $c_0=5\%$ ($Gr_c=6 \cdot 10^8$) начало отсчета времени смещено на 163 с по указанным выше причинам. Согласие данных расчета и эксперимента удовлетворительное.

Переходя к интерпретации результатов, сопоставим их с данными работ [6, 10]. В случае малого перепада плотности между слоями жидкости, согласно теории [10], заглубление фронта перемешивания должно происходить с постоянной скоростью. В данном случае, учитывая величину коэффициента $\beta_c = 5 \cdot 10^{-5}$ (%)⁻¹, найдем

$$(\rho_c - \rho_0)/\rho_0 = \beta_c c_0 = (2,5 \div 0,2) \cdot 10^{-4} \ll 1.$$

Скорость продвижения фронта постоянна и равна 1 и 0,4 см/с для $c_0=5$ и $0,4\%$ соответственно (см. рис. 5.11). В работе [6] для расчета скорости продвижения фронта предложена формула

$$h = \alpha \sqrt{g \beta_c h_0 \Delta c_0} t, \quad (5.10)$$

где h_0 и Δc_0 — начальная глубина и относительная соленость тяжелого слоя; α — коэффициент пропорциональности. На рис. 5.11 прямая нанесена по результатам [6].

Согласно терминологии работ [6, 10], изучаемый случай перемешивания можно назвать режимом турбулентного перемешивания с постоянной скоростью. Этот режим является автомодельным. Отметим, что это случай наиболее медленного распространения конвективного фронта из рассмотренных в [6]. Так, если на поверхности охлаждаемого объема задан постоянный поток тепла, то $h \sim t^{3/2}$, а при постоянной граничной температуре $h \sim t^2$ (режим свободного падения).

В работе [269], где экспериментально изучалась турбулентная конвекция при подогреве снизу слоя воды, для скорости турбулентного течения в центре слоя получена формула

$$v = 1,05 Ra^{0.43} Pr^{1/3} H/a, \quad (5.11)$$

где H — полная глубина слоя; a — коэффициент теплопроводности. Переписав формулу (5.11) в виде

$$v = 1,05 (H/D) Sc^{0.78} Gr^{0.43}, \quad (5.12)$$

определим для v значения 1,4 и 0,6 см/с для c_0 , равного 5 и 0,4% соответственно, что близко к результатам, представленным на рис. 5.11 (1 и 0,4 см/с).

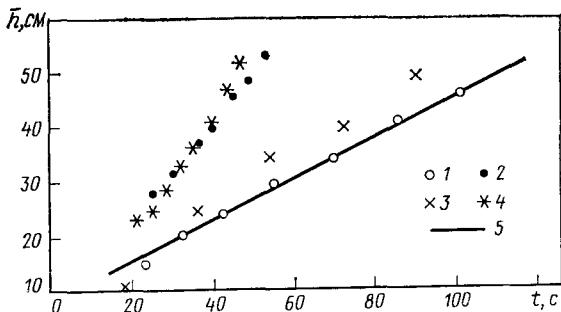


Рис. 5.11. Зависимость глубины перемешанной жидкости от времени [24]

- 1, 2 — эксперимент,
- 3, 4 — расчет,
- 5 — данные теории [6],
- 1, 3 — $Gr_c = 6 \cdot 10^8$,
- 2, 4 — $Gr_c = 8 \cdot 10^8$

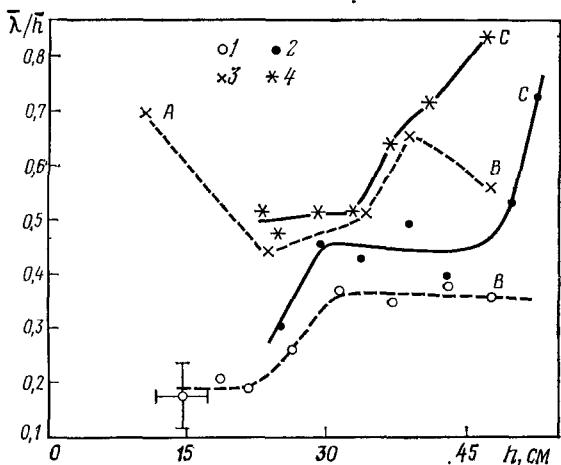


Рис. 5.12. Относительные размеры конвективных элементов в зависимости от глубины перемешанной жидкости

Обозначения точек см. на рис. 5.11

Из рис. 1 работы [24] следует, что и в эксперименте, и в расчете число конвективных элементов (соленоидных «термиков») по мере их заглубления сокращается. Можно ввести количественную характеристику $\bar{\lambda} = L/N$, где L — длина бассейна; N — число конвективных элементов. Зависимость относительной величины λ/h от h представлена на рис. 5.12. Различие вариантов с $c_0=5$ и $0,4\%$ хорошо проявляется и здесь. Согласие расчета и эксперимента здесь, конечно, только качественное — наблюдается характерное «плато», или ярус, в диапазоне глубин $20 \leq h \leq 40$. Точка, отмеченная буквой A , относится к нефизической предыстории двумерного режима течения с постоянной скоростью, и ее большое отклонение от экспериментальных точек объясняется именно этим. Скачкообразное увеличение относительной перемежаемости (точка C) на заключительной стадии в расчете и эксперименте, вероятно, объясняется сильным влиянием боковых границ.

Интересно отметить, что в лабораторном эксперименте в одном варианте ($c_0=0,4\%$, $h_0=1,5$ см) на заключительном этапе имеются три «термика», а в другом варианте ($c_0=5\%$, $h_0=3$ см) — четыре. На рис. 5.12 это приводит к значительному удалению точек C от точек B . Увеличение относительного масштаба конвекции в виде скачкообразных переходов от одного «плато», или яруса, со своим характерным масштабом к другому может быть следствием влияния как геометрии границ, так и особенности роста масштаба конвективных ячеек. В данном случае, по-видимому, определяющим было влияние геометрии бассейна, которая навязывает ограниченное число крупных ячеек.

Таким образом, двумерная математическая модель конвекции на основе уравнений Навье—Стокса (1.4) удовлетворительно описывает процесс перемешивания в двухслойной жидкости при неустойчивой стратификации на стадии развитого перемешивания.

5.2.3. Конвекция при охлаждении однородной жидкости

Для изучения в однородной жидкости конвекций, вызванной охлаждением свободной поверхности раздела газ—жидкость, используем математическую модель конвекции, аналогичную уравнениям (5.7) — (5.9). Вместо уравнения (5.9) будем использовать уравнение переноса тепла, которое входит в модель конвекции (1.4). Теплообмен на плоской покоящейся поверхности раздела газ—жидкость в наших условиях определяется следующими физическими механизмами: теплопроводностью, конвекцией, массопереносом пара, а также остыванием за счет теплового излучения поверхности. Будем считать, что интегральный теплоперенос всеми этими механизмами приводит к постоянному тепловому потоку на поверхности раздела $\partial\theta/\partial n = Nu$. В таком случае процессы теплообмена в газе можно не рассматривать. На возмож-

ность раздельного решения задач теплообмена в газе и в жидкости указано также в работе [175]. При $Nu=1$ весь теплообмен на поверхности определяется теплопроводностью в тонком приповерхностном слое жидкости. Охлаждаясь, этот слой становится тяжелее лежащей ниже жидкости и по достижении критической толщины отрывается от поверхности, образуя термики. Процесс охлаждения, зарождения и отрыва термиков проходит через ряд стадий.

1. Образование радиационной «холодной пленки» жидкости вблизи поверхности. Это происходит за счет инфракрасного излучения практически мгновенно после начала охлаждения. Ввиду малой толщины пленки (порядка 10 мкм) объем воды в ней мал и для зарождения термиков несуществен.

2. Образование «молекулярной холодной пленки» — температурного пограничного слоя и рост его толщины до критического значения, соответствующего Ra_1^* , при котором начинается конвективное движение.

3. Развитие конвекции в форме валов. Рост интенсивности конвекции сопровождается увеличением поперечного линейного масштаба валов. Диаметр конвективных ячеек увеличивается.

4. По достижении толщины конвективного слоя, соответствующей Ra_2^* , развивается неустойчивость и образуются термики.

5. Отрыв термиков от поверхности. Начало нового цикла зарождения и отрыва термиков.

6. При увеличении числа Рэлея до $Ra_3^* \approx 2,5 \cdot 10^4$ происходит переход от ламинарного к турбулентному режиму течения с нерегулярным линейным масштабом. Термики приобретают характерную трехмерную форму «гриба», очень близкую к форме соленоидных «термиков», рассмотренных в п. 5.2.2.

Изучение начальных стадий 1 и 2 выполнено численно в работе [266], где предложена одномерная радиационная модель «холодной пленки». Стадии 2—4 образования термиков в однородной среде численно моделировались в работе [56], где основное внимание было уделено правильному описанию также «холодной пленки», но обусловленной молекулярным теплообменом.

Классификация неустойчивостей при переходе к основным стадиям образования термиков (2—4) дана в работе [198]. Из диаграммы устойчивости для воды, приведенной в [198], следует, что образование конвективных валов может происходить либо по двумерному механизму, либо из-за различных трехмерных неустойчивостей. Различия в критических числах Рэлея и длине волны между всеми этими неустойчивостями очень малы и, по-видимому, представляют лишь теоретический интерес.

Как следует из линейного анализа устойчивости [198], переход от конвективных валов к термикам (стадия 4) происходит из-за развития трехмерной неустойчивости. Моделирование этого процесса на основе двумерных уравнений является поэтому

только качественным и имеет обоснование в экспериментах [267], где наблюдалась термики в форме «листов», у которых один линейный размер много больше другого. Такие термики преобладают при потоках тепла с поверхности до $200 \text{ Вт}/\text{м}^2$. При более интенсивном охлаждении, когда поток тепла составляет $300 \text{ Вт}/\text{м}^2$ и выше, преобладают термики в форме «вихрей» или «смерчей», которые на поверхности воды образуют воронку [186].

Таким образом, есть основания полагать, что при умеренных потоках тепла (до $200 \text{ Вт}/\text{м}^2$) двумерная математическая модель конвекции будет удовлетворительно описывать и стадию образования валов, и стадию образования термиков. При численном моделировании этого процесса необходимо обеспечить достаточное удлинение слоя, так как при небольшом отношении длины слоя L к глубине конвекции $H_{\text{конв}}$ начинают сильно влиять условия на боковых границах области. Этот вопрос изучался экспериментально [228] и теоретически [261]. Установлено, что при $L/H_{\text{конв}} \approx 1$ влияние боковых границ становится существенным.

На рис. 5.13 показаны изолинии температуры и функции тока, полученные в результате расчетов по основной конечно-разностной схеме (1.13). Полные размеры расчетной области: глубина $H=0,1 \text{ м}$, ширина $L=0,1 \text{ м}$, число Рэлея $\text{Ra}=2,8 \cdot 10^8$, Прандтля $\text{Pr}=7$. Для решения уравнения Пуассона в варианте с неравномерной сеткой 65×65 применялся итерационный метод

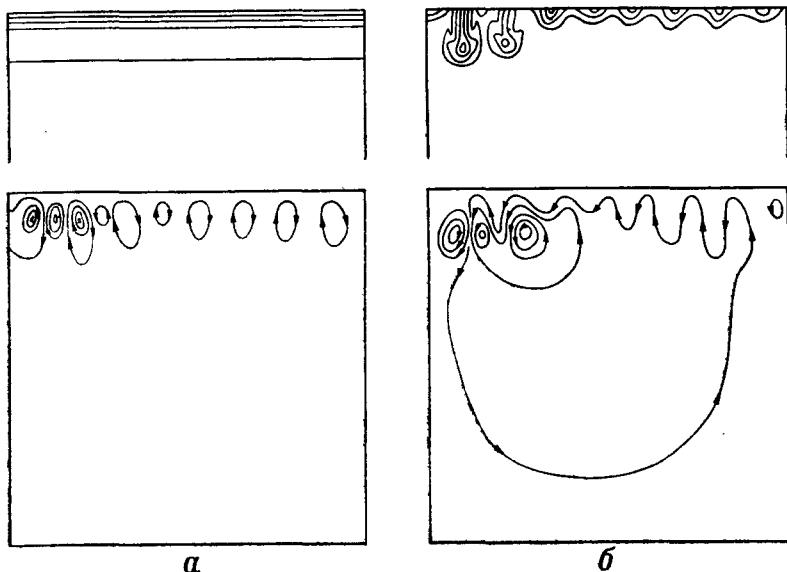


Рис. 5.13. Образование конвективных валов (а) и циклический отрыв конвективных элементов (б) при охлаждении поверхности однородной жидкости
Вверху — изолинии температуры, внизу — функции тока

(см. разд. 6.1). При расчетах на сетке, равномерной в обоих направлениях, которая позволяет использовать эффективный маршрут-алгоритм (см. п. 1.1.3), основная схема (1.13) была модифицирована. Использовалось интегральное граничное условие [156]

$$q = (h_i/2)(\theta_1^{n+1} - \theta_1^n)/\tau - (\theta_1^{n+1} - \theta_0^{n+1})/h_i.$$

Результат применения этой модификации дан на рис. 1.9 и 5.15.

Конвективные ячейки на рис. 5.13 имеют примерно равную глубину и длину. Число ячеек равно десяти, так что $L/H_{\text{конв}} \approx 10$ и влияние боковых границ должно быть несущественным. Видимая на рис. 5.13 асимметрия в развитии термиков связана с использованием неконсервативного граничного условия для температуры в схеме (1.13). Пространственный масштаб конвекции, определяемый по сечению «шляпки» термика, равен $\lambda = 1,4$ см. Скорость заглубления термиков, определяемая по положению «шляпки» термика в последовательные моменты времени, равна 0,5 см/с.

Для интерпретации результатов численного моделирования обратимся к работам [19, 48, 53], где получен ряд соотношений, связывающих наблюдаемые характеристики конвекции при охлаждении однородной жидкости с определяющими параметрами. В табл. 5.2 сопоставляются данные теории, эксперимента и численного счета.

В работе [219] предложены формулы для оценки максимальной вертикальной скорости заглубления термика

$$v_{\max} = 5,2 \left(g\beta_T \frac{q}{\kappa} \frac{\lambda^3}{v} \right)^{1/4} \quad (5.13)$$

и горизонтального масштаба конвекции

$$\lambda = 27,0 \left(\frac{\gamma v}{g\beta_T} \frac{\kappa}{q} \right)^{1/4}. \quad (5.14)$$

(В недавней работе [220] для режима турбулентной конвекции в формуле (5.14) для численного коэффициента дается значение 48.)

Таблица 5.2. Оценки наблюдаемых характеристик конвекции в однородной жидкости по данным численного счета, лабораторного эксперимента и теории при потоке тепла с поверхности воды 120 Вт/м²

Характеристика	Расчет	Эксперимент	Теория
Масштаб термика, см ($\lambda \sim Ra_q^{-1/4}$)	1,4	1—2	~2
Скорость опускания термика, см/с ($v \sim Ra_q^{1/4}$)	0,5	0,3 ± 0,1	~0,1
Период индукции конвекции, с ($t \sim Ra_q^{-1/2}$)	50	50—60	~40

Если ввести число Рэлея по потоку тепла q

$$Ra_q = g\beta_t q H^2 / \nu \kappa \chi \quad (5.15)$$

и масштабы времени $t_0 = H^2 / \chi$, расстояния H и скорости $v_0 = \chi / H$, то формулы (5.13), (5.14) можно записать в виде

$$v'_{\max} = 5,2 Ra_q^{1/4}, \quad \lambda' = 27,0 Ra_q^{-1/4}. \quad (5.16)$$

Расчет по этим формулам с $Ra_q = 2,8 \cdot 10^8$ дает $v_{\max} = 0,1$ см/с, $\lambda = 2$ см. Эти данные приведены в табл. 5.2 в графе «теория». Скорость заглубления термиков в расчете (0,5 см/с) несколько завышена, что, по-видимому, связано с двумерностью математической модели.

Наибольшие трудности вызывает интерпретация данных о пространственных масштабах термиков. На примере задачи Рэлея — Бенара [41] известно, что масштаб конвекции может существенно изменяться в зависимости от граничных условий. Ввиду того что информация о граничных условиях недостаточна, согласие данных о масштабах термиков в теории, эксперименте и численном счете имеет предварительный характер.

Основная особенность конвекции при охлаждении свободной поверхности жидкости — в циклическом повторении стадий рождения и отрыва термиков. Период генерации (индукции) термиков был оценен экспериментально в работе [48]. Период индукции легко определяется по временной эволюции температуры поверхности.

На рис. 5.14 показан ход изменения температуры поверхности до отрыва и после отрыва термиков (кривая 4 — лабораторные измерения термистором с размером измерительной головки 0,2 мм, который подводился к поверхности вода—воздух снизу, почти до касания [20, 49]; 5 — лабораторные измерения [219] радиационной температуры поверхности дистанционным датчиком инфракрасного излучения (радиометром)).

Одни и те же результаты численного моделирования нанесены на рис. 5.14 в разных масштабах. Кривая 1 отвечает случаю охлаждения однородной среды и получена путем осреднения температуры поверхности по всей длине L свободной поверхности расчетной области (см. рис. 5.13). Длительность и скорость понижения температуры до отрыва термика хорошо согласуются с экспериментом. Характерное повышение температуры после отрыва термиков в расчете явно утрировано. Это связано с отмеченным выше расхождением в величинах скорости заглубления термиков (см. табл. 5.2), что приводит к слишком быстрому замещению холодных объемов воды у поверхности на свежие порции из глубины, еще не подвергнувшиеся охлаждению.

Для расчетов времени индукции (время роста температурного пограничного слоя у поверхности до критической толщины δ) при охлаждении свободной поверхности воды в комнатных условиях в работе [48] предложена формула

$$t_{\text{инд}} = 10,2 \sqrt{\frac{\nu}{\chi} \frac{\kappa}{q} \frac{1}{g\beta_t}}. \quad (5.17)$$

Используя введенные выше масштаб времени и число Рэлея по потоку, преобразуем (5.17) к виду

$$t'_{\text{инд}} = 10,2 \text{ Ra}_q^{-\frac{1}{2}}. \quad (5.18)$$

Результаты расчетов по этой формуле, а также данные рис. 5.14 (кривая 1) и экспериментов [37, 49] приведены в табл. 5.2. Расчет по формуле (5.18) дает меньшее значение времени индукции, чем численный счет и эксперимент. Это объясняется тем, что формула (5.18) относится к стационарному режиму конвекции, когда цикл нарастания пограничного слоя и обрушения термика многократно повторяется и, следовательно, потеря устойчивости пограничного слоя происходит на фоне значительных возмущений от предшествовавших термиков, в то время как расчет по модели (5.7), (5.8), (1.4) велся из состояния полного покоя. Последнее замечание относится и к оценкам по формулам (5.13) и (5.14).

Перейдем к оценке критического числа Рэлея и понижения температуры поверхности, связанного с отрывом термиков. Из

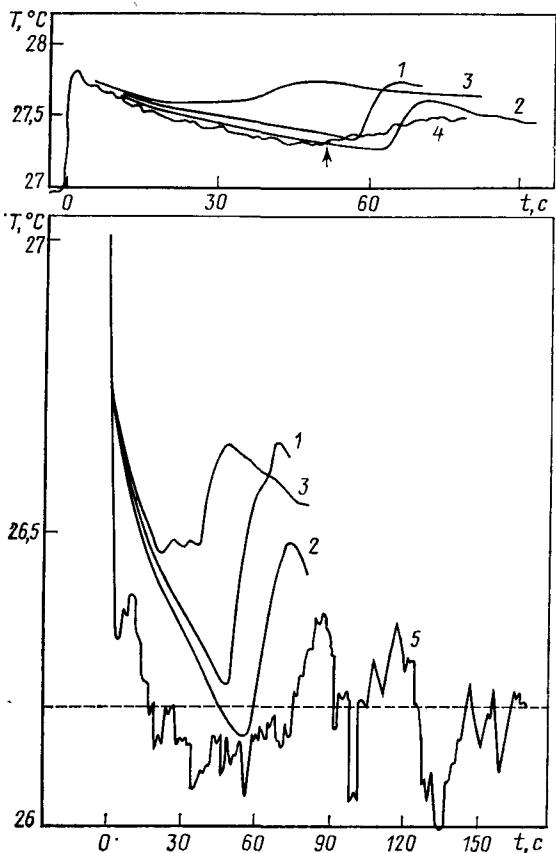


Рис. 5.14. Изменение во времени температуры поверхности от начала охлаждения до момента образования термиков (указан стрелкой)

- 1 — 3 — результаты расчета
- (1 — охлаждение однородной жидкости,
- 2 — охлаждение в стратифицированной жидкости,
- 3 — охлаждение при наличии движения в объеме жидкости),
- 4, 5 — данные лабораторных измерений [219] и [20] соответственно

представленной на рис. 5.14 зависимости средней температуры поверхности от времени (кривая 1) следует, что перепад температуры поверхности $\Delta T_{\text{пов}}$, при котором начинается отрыв термиков, равен $0,45^\circ \text{C}$.

Для оценки критического числа Рэлея перехода от конвекции в форме валов к конвекции в форме термиков используем известное [52] соотношение

$$\text{Nu} = c \text{Ra}^{\frac{2}{3}}. \quad (5.19)$$

Это соотношение, во-первых, связывает поток тепла q с перепадом температуры $\Delta T_{\text{пов}}$, а во-вторых, может служить для оценки Ra_2^* , при котором наступает кризис молекулярной теплопередачи, когда $\text{Nu}=1$. Таким образом, дважды используя соотношение (5.19), можно исключить константу c и определить

$$\text{Ra}_2^* = \Delta T_{\text{пов}}^4 q \beta_T H^3 \kappa^3 / \nu \chi q^3 \approx 67. \quad (5.20)$$

Хорошее совпадение этой оценки с результатом работы [49], где приведено значение $\text{Ra}_2^*=65$, объясняется согласием значений $\Delta T_{\text{пов}}=0,45^\circ \text{C}$, полученного в численном счете, со значением $\Delta T_{\text{пов}}=0,43^\circ \text{C}$, рассчитанным по формуле (5.19) для величины потока тепла $q=120 \text{ Вт}/\text{м}^2$ с эмпирическим коэффициентом $c=11,1$ [220].

Необходимо подчеркнуть, что здесь оценено критическое число Рэлея потери устойчивости конвективных ячеек и образования термиков. Тот факт, что при этом использовался критерий начала конвекции $\text{Nu}=1$, означает, что в данной задаче в отличие от задачи Рэлея—Бенара перенос тепла конвекцией в форме валов очень мал и определяющее значение для переноса тепла имеет начало конвекции в виде термиков. Вместе с тем влияние конвекции в форме валов на поле скорости приводит к существенному снижению устойчивости. По этим причинам нет смысла сопоставлять приведенную здесь оценку Ra_2^* с данными линейной теории устойчивости [41, 198].

В работе [267] по измерениям профилей температуры при охлаждении поверхности воды было найдено два критических числа Рэлея: начала конвекции $\text{Ra}_1^*=1190$ и перехода к стационарному режиму конвекции в форме термиков $\text{Ra}_2^*=109$. Существенное понижение устойчивости во втором случае в [267] объясняется влиянием динамических возмущений в жидкости от термиков первых «поколений». На рис. 5.14 представлена зависимость температуры поверхности от времен (кривая 3) для больших начальных возмущений поля скорости. В этом случае потеря устойчивости термического пограничного слоя и отрыв термиков происходят при существенно меньшем перепаде температур $\Delta T_{\text{пов}}$ и, следовательно, меньшем Ra_2^* .

В целом полученные результаты численного моделирования ламинарной конвекции при охлаждении поверхности глубокого (по сравнению с размером конвективных валов) объема воды хорошо согласуются качественно, а по некоторым параметрам

и количественно с лабораторным экспериментом и теоретическими оценками, основанными на представлениях о циклическом характере конвекции.

5.2.4. Конвекция и внутренние волны при охлаждении стратифицированной жидкости

Постановка задачи о конвекции в стратифицированной среде отличается от задачи, рассмотренной в п. 5.2.3, наличием начально-го линейного профиля температуры, что обеспечивает устойчивую стратификацию жидкости. Математическая модель и схема расчета остаются без изменений. На боковых границах расчетной области используются условия периодичности, а среди параметров задачи появляется дополнительный параметр, характеризующий начальную стратификацию. Общая картина развития конвекции (рис. 5.15) та же, что и в случае первоначальной однородной среды. Основное отличие обнаруживается после отрыва термиков (стадия 5): из-за устойчивой стратификации они не могут проникать до дна расчетной области, а растекаются вблизи своего уровня нейтральной плавучести, тем самым формируя верхнюю перемешанную зону.

Кроме особенностей конвекции, которые обсуждались в п. 5.2.3, в случае разрушения первоначальной устойчивой стратификации необходимо отметить процессы образования перемешанной зоны и генерации внутренних волн. Воздействие термиков на границу перемешанной зоны с устойчиво стратифицированной средой приводит в некоторых случаях к образованию внутренних волн в толще стратифицированной области. Это явление изучалось в работах [20, 271] и отмечено в экспериментах [37]. В экспериментах [196] образования внутренних волн в устойчиво стратифицированной области не наблюдается, хотя на интерферограммах можно выделить поверхности равных фаз.

В работе [271] сформулированы условия генерации внутренних волн конвективными элементами: $(Nt_{\text{вз}})^2 \gg 1$, где N — частота плавучести (см. гл. 1) устойчиво стратифицированной области, $t_{\text{вз}}$ — время взаимодействия конвективного элемента с окружающей жидкостью. По данным численного моделирования, время существования отдельного термика примерно 16 с. Это время можно принять в качестве $t_{\text{вз}}$. Частота плавучести $N = 0,2 \text{ с}^{-1}$. При таких значениях параметров получим $(Nt_{\text{вз}})^2 = -64 \gg 1$, и, следовательно, должна происходить интенсивная генерация внутренних волн термиками. Параметры генерируемых волн в эксперименте и расчете оказались близкими: в лабораторном эксперименте длина волны $\lambda \approx 2 \text{ см}$, амплитуда $A \approx 0,3 \text{ см}$ ($A/\lambda = 0,13$), при численном моделировании $\lambda = 3 \text{ см}$, $A = 0,4 \text{ см}$ ($A/\lambda = 0,13$).

Для дальнейшего анализа картины движения в различных зонах обратимся к рис. 5.10. Можно выделить следующие зоны:

1. Холодная пленка толщиной около 0,2 мм. Существование этого слоя хорошо подтверждается экспериментами [161, 266]. В численном расчете шаг сетки $h_i=0,6$ мм, что явно недостаточно для моделирования холодной пленки.

2. Температурный пограничный слой. Его толщина максимальна в момент, предшествующий отрыву очередного термика; после отрыва термика толщина этого слоя минимальна ($\delta \approx 1$ мм).

3. Область, охваченная конвекцией, размер которой непрерывно возрастает. На начальном этапе он определяется размером конвективных ячеек и со временем растет благодаря процессу сокращения числа ячеек при одновременном увеличении их размеров. После образования термиков закономерности увеличения глубины $H_{\text{кон}}$ становятся совершенно другими.

4. Пограничная область между перемешанной зоной и устойчиво стратифицированной, размер которой порядка амплитуды внутренней волны на этой границе $A \approx 0,5$ см.

5. Область проникновения внутренних волн в устойчиво стратифицированную область, критическую глубину можно определить по формуле

$$z_{\text{кр}} = H^3/vN^3t_{\text{вз}}^4 \approx 0,2 \text{ см.}$$

На глубинах, превышающих критическую, амплитуда внутренних волн убывает по степенному закону. Сильная зависимость (в кубе) критической глубины распространения внутренних волн от размеров области, охваченной конвекцией, приводит к тому, что вскоре после образования первых термиков внутренние волны достигают дна расчетной области, отражаются от нее и начинается процесс «раскачивания» всего стратифицированного слоя, тем самым нарушаются подобие физических механизмов в численной модели и эксперименте. Отражение от боковых границ расчетной области здесь исключено благодаря условиям периодичности.

Начальная стадия развития конвекции в стратифицированной среде практически не отличается от случая однородной среды. На этой стадии конвективные ячейки занимают несколько меньший объем жидкости, чем в случае однородной жидкости. Запас потенциальной энергии к моменту образования первых термиков несколько больше: средняя температура поверхности понижается до $\Delta T_{\text{нов}}=0,5^\circ\text{C}$ против $\Delta T_{\text{нов}}=0,45^\circ\text{C}$ в случае однородной среды (см. рис. 5.14). Термики образуются несколько позже ($t_{\text{инд}}=60$ с вместо 54 с в однородном случае). Критическое число Рэлея образования валов, согласно теоретическим оценкам [248, 276], для случая слабой стратификации ($\text{Ra}_0 \ll 1$) определяется по формуле

$$\text{Ra}_1^* = 35 \sqrt[4]{\text{Ra}_0} \approx 6,6. \quad (5.21)$$

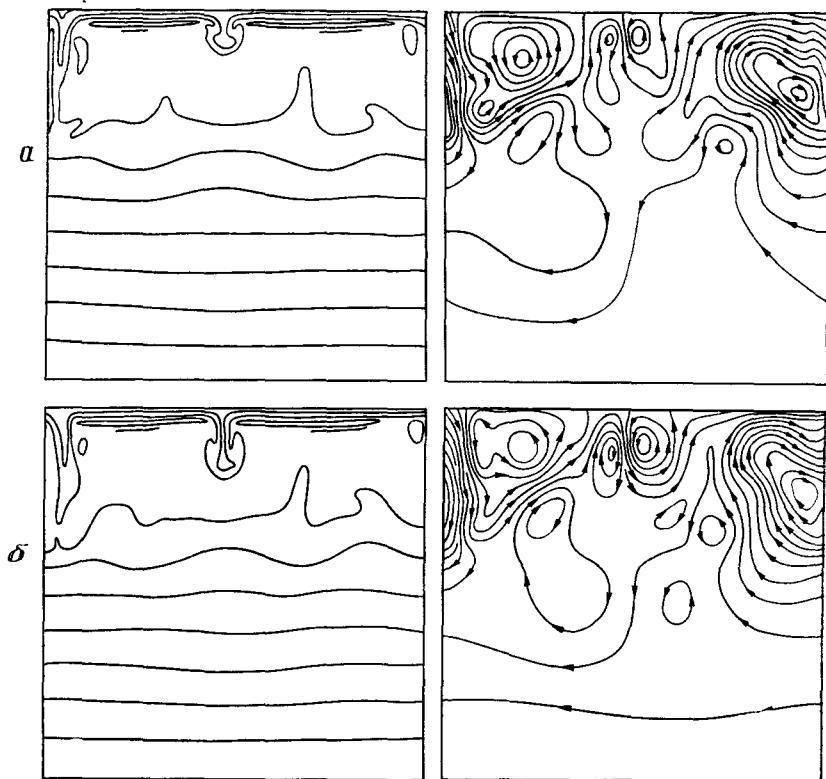


Рис. 5.15. Развитие во времени процесса взаимодействия конвективных элементов и внутренних волн при охлаждении стратифицированной жидкости
Слева — изолинии температуры, справа — функции тока

Длину волны образующихся конвективных валов можно оценить по формуле

$$\lambda/\delta = 2\pi/0,6Ra^{1/4} \approx 55, \quad (5.22)$$

а число валов — по формуле $n = L/\lambda \approx 2$.

Эти оценки показывают, что согласно теории и в данном случае проявляется общая тенденция: по мере снижения устойчивости критическое число Рэлея стремится к нулю, а длина волны растет [41]. При численном моделировании конвективные ячейки возникают практически мгновенно, после начала охлаждения, однако длина волны валов в случаях со стратификацией и без нее практически одинакова. Возможно, это объясняется влиянием боковых границ, подобно тому как это имеет место в задаче Рэлея—Бенара [228, 261].

Глубину слоя, охваченного конвекцией, на этой стадии можно оценить по формуле

$$H_{\text{конв}} = \delta + \delta/Ra^{1/4} \approx 6\delta \approx 6 \cdot 10^{-3} \text{ м.} \quad (5.23)$$

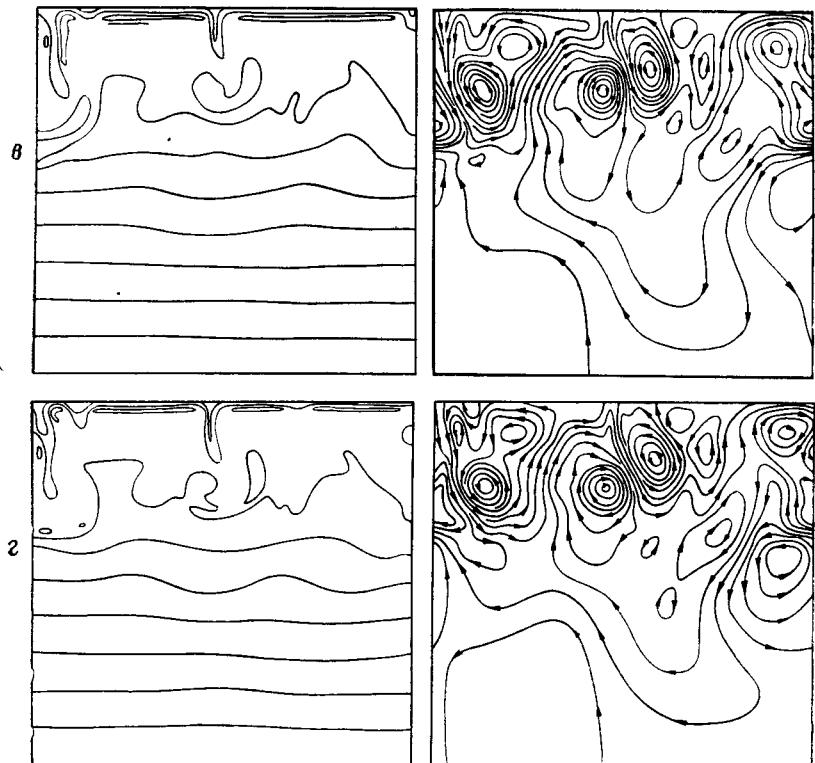


Рис. 5.15 (окончание)

Таким образом, согласно теории конвективные ячейки должны быть сплюснутыми:

$$\lambda/H_{\text{конв}} \approx 10.$$

При численном моделировании, однако, $\lambda \sim H_{\text{конв}}$ и имеется тенденция увеличения глубины ячейки, т. е. $\lambda < H_{\text{конв}}$. Вероятно, предсказанные линейной теорией вытянутые по горизонтали ячейки оказываются неустойчивыми и не наблюдаются при численном моделировании.

Границу устойчивости конвективных ячеек, как и в случае однородной среды, можно оценить по формуле

$$Ra_2^* = \Delta T_{\text{пор}}^4 g \beta_T H^3 \kappa^3 / \nu \chi q^3 \approx 102. \quad (5.24)$$

Как и следовало ожидать, наличие стратификации повышает устойчивость конвективных валов. Характер заглубления термиков при наличии стратификации принципиально отличается от однородного случая. Как уже отмечалось, при этом происходит

генерация внутренних волн, которые уносят значительную часть энергии термиков.

Теория заглубления слоя перемешанной жидкости, которая с достаточной точностью предсказывает значение скорости заглубления, изложена в работах [6, 10, 29, 115]. В этих работах, однако, изучается турбулентный режим конвекции, который рассматривался в п. 5.2.2 на примере обрушения тяжелого слоя в двухслойной системе. Генерация же внутренних волн может наблюдаться как при турбулентной, так и при ламинарной конвекции. В естественных океанических условиях характерные пространственные масштабы внутренних волн ($\lambda_{\text{вв}} \approx 500 \div 1500$ м) обычно много больше масштабов конвекции ($\lambda_{\text{конв}} \approx 10 \div 100$ м), поэтому эффективный обмен энергией между внутренними волнами и конвекцией затруднен.

Теоретически, однако, нелинейное взаимодействие между волновыми и конвективными движениями вполне возможно. На такое взаимодействие указывается также в экспериментальных работах [236], посвященных неоднородностям штилевой погоды в океане. Короткие внутренние волны, взаимодействующие с конвекцией, могут генерироваться как в результате охлаждения поверхности в условиях штилевой погоды, так и в результате действия естественных или искусственных источников. Короткопериодные внутренние волны, возникающие под воздействием конвективных движений, в реальных условиях могут генерироваться также и в тонких прослойках в течениях со сдвигом [105].

Различный характер эволюции температуры поверхности в разных условиях (см. рис. 5.14, кривые 1—3) демонстрирует связь температуры поверхности с динамическими процессами в толще жидкости, что представляет интерес для интерпретации дистанционных измерений температуры океана [109, 175].

Глава 6

СПЕЦИАЛЬНОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Рассмотренные в гл. 3—5, а также многие не вошедшие в книгу результаты (см., например, [60—64, 128, 131, 148]) получены с помощью специального математического обеспечения, систематически разрабатывавшегося для решения этого класса задач в Институте проблем механики АН СССР применительно к единой серии (ЕС) ЭВМ.

На первом этапе этой работы был создан программный комплекс, имеющий модульную структуру, на основе метода конечных разностей (МКР) [22, 23]. В состав этого комплекса входили группы управляющих счетных программ, программ статистической и графической обработки и вспомогательных программ. Была создана также первая версия комплекса программ на основе метода конечных элементов (МКЭ) [147], реализованная на ЭВМ серии ICL. Возможности этой версии МКЭ в задачах конвективного теплообмена ограничивались только тепловой конвекцией в замкнутых областях.

В последние 5—6 лет специальное программное обеспечение для решения задач конвективного тепломассообмена на основе нестационарных уравнений Навье—Стокса получило значительное развитие в связи с его активным применением и накоплением опыта решения задач, а также с использованием для этого класса задач специального процессора (МАМО).

В связи с созданием программной поддержки МАМО на языках высокого уровня [54] были разработаны модули векторизованных счетных программ комплекса МКР. Существенно расширилось представление в комплексе конечно-разностных схем, обзор которых дан в разд. 1.1. Разработаны также комплексы программ специального назначения, в которых учитываются конкретные особенности некоторых методов выращивания кристаллов. Значительное развитие получила программная поддержка графических систем [50]. Комплекс программ на основе метода конечных элементов (МКЭ) переработан, адаптирован для ЕС ЭВМ и расширен на класс задач конвективного тепло- и массообмена в цилиндрических координатах для случая совместного действия естественной и вынужденной конвекции [126, 127, 151].

В связи с таким развитием и специализацией математического обеспечения оказалось целесообразным выделение ряда групп программ, например программ статистической и графической обработки, в отдельные программные комплексы. Это нашло отра-

жение при написании данной главы. Сведения о разработанном авторами книги и их коллегами в Институте проблем механики АН СССР специальном математическом обеспечении приведены здесь в основном по состоянию на 1985 г. Приводятся сведения о двух основных программных комплексах, использующих МКР и МКЭ (разд. 6.1 и 6.2 соответственно), и о трех вспомогательных программных комплексах: программной поддержке матричного модуля МАМО (разд. 6.3), комплексе статистической обработки (разд. 6.4) и о графических системах (разд. 6.5). Все программное обеспечение многократно проверено и используется не только авторами книги, но и независимо многими другими пользователями.

6.1. КОМПЛЕКС ПРОГРАММ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ

Программная реализация конечно-разностных схем (см. разд. 1.1) тесно связана с их структурой, областью применения и с техническими характеристиками ЭВМ. Ниже приведены основные данные о комплексах программ на основе МКР общего и специального назначения, написанных на языке Фортран для ЕС ЭВМ. Результаты решения могут зависеть от точности представления данных в ЭВМ (особенно это относится к расчетам при больших числах Рэлея и на сетках с мелким шагом $h \leqslant 0,01$), поэтому в упомянутых комплексах имеются варианты программ со стандартной и двойной точностью. В обоих вариантах программ использована аппроксимация операторов на сетке с произвольным изменением шага по каждому из двух направлений. Исключение составляют векторизованные программы для МАМО ЕС-1055М, в которых предполагается сетка с постоянным шагом. При реализации счетной части комплексов большое внимание уделялось скорости выполнения расчетов. В подпрограммах имеются средства управления, обеспечивающие изменение геометрии, аппроксимации разностной схемы и т. д.

6.1.1. Комплекс программ общего назначения

Основные подпрограммы счетной части комплекса приведены в табл. 6.1. Они выполнены в виде отдельных модулей, между которыми осуществляется передача данных в основном через общие области оперативной памяти (COMMON-блоки). В таблице перечислены модули трех уровней: 1) для управления процессом счета (например, COMPLD для декартовой системы координат); 2) для реализации конкретного метода решения разностных уравнений и вычисления граничных условий (PUASD, SPND, BOUND); 3) для выполнения «элементарных» или разовых вычислительных работ (RTN, CNTRD, OPTIMJ и др.). При работе с комплексом программ задаются физические параметры (числа Грасгофа, Прандтля, Марангони), начальные и граничные усло-

Таблица 6.1. Полпрограммы комплекса для решения нестационарных уравнений конвекции методом конечных разностей

№ п/п	Название	Назначение	Количество строк
1	COMPLD	Управление расчетом	34
2	PUASD	Решение уравнения Пуассона	102
3	SPND	Решение уравнения переноса	101
4	BOUND	Расчет граничных условий на твердой стенке для вихря и функции тока	44
5	PCHD	Расчет правой части уравнения переноса	20
6	CNTRD	Контроль точности решения уравнения Пуассона	26
7	RTN	Расчет по формулам обратной прогонки	16
8	RPA	Одномерное быстрое преобразование Фурье (БПФ)	39
9	SETFT	Предварительное вычисление коэффициентов для БПФ	28
10	OPTIMJ	Расчет оптимального набора итерационных параметров для решения уравнения Пуассона	32
11	MSPN	Архивный модуль на языке Мортран. Содержит различные варианты модулей для решения уравнения переноса и тесты	400
12	EXMAMO	Явная схема для уравнений конвекции с использованием спецпроцессора МАМО	200
13	ARAKAW	Явная схема Аракавы для уравнения переноса	20
14	SPNF	Дивергентная неявная схема для уравнений переноса	103
15	SPNF1	То же с учетом переменной вязкости	107
16	BOUNDA	Итерационный способ расчета граничных условий для вихря в декартовой системе координат	100
17	PUASD2	Модифицированный итерационный метод расчета уравнения Пуассона	71
18	TMOMAM	Пакет векторизованных программ для решения задач конвекции в декартовой системе координат для МАМО ЕС-1055М	400

вия, сеточные параметры (количество и расположение узлов пространственной сетки, шаг по времени или алгоритм его вычисления), управляющие параметры (количество уравнений переноса, тип аппроксимации конвективных членов и др.). Для сокращения времени счета в некоторых подпрограммах предусмотрено хранение промежуточных результатов, например одномерных массивов коэффициентов прогонки, которые редко или совсем не изменяются в процессе счета.

Модули, входящие в состав комплекса, хранятся в загрузочном виде. Подключение необходимых для расчетов модулей осуществляется, как правило, средствами редактора связей операционной системы ЕС ЭВМ. При выполнении методических работ часто возникает необходимость изменения исходных текстов. С этой целью используется архивный модуль на языке Мортран

[17], из которого с помощью специального препроцессора формируется текст на Фортране.

Одной из важнейших характеристик программ для решения двумерных уравнений Навье—Стокса является время счета на ЭВМ. Для сокращения времени счета в комплексе, кроме основных расчетных массивов (для функции тока, завихренности, температуры и концентрации), введены дополнительные массивы для вертикальной и горизонтальной скоростей и правой части уравнения переноса завихренности. При этом экономия машинного времени достигнута за счет увеличения используемой оперативной памяти. Для уменьшения временных затрат модули расчета в декартовых и цилиндрических системах координат выполнены независимо.

Большое влияние на время счета оказывает качество программной реализации алгоритма и оптимизирующие свойства транслятора. Ниже представлены данные о работе трансляторов и о затратах времени на решение уравнения переноса тепла (1.8).

Транслятор	OE	OP	SE	CC	ST
Время работы модуля SPNT, с	3,52	3,57	5,26	5,58	5,73
Время трансляции, с	17,98	17,39	12,09	8,96	12,86
Размер загрузочного модуля, байт	3906	4068	4976	5032	4984

На одном временном слое с помощью модуля SPNT на языке Фортран были получены пять вариантов программы, транслированной имеющимися на ЭВМ ЕС-1055М трансляторами. Как видно из представленных данных, времена счета на сетке 65×63 могут различаться в 1,5 раза в зависимости от качества оптимизации программы.

Процессорное время ЭВМ ЕС-1040, необходимое для решения всей системы уравнений (1.6)–(1.8) на неравномерной сетке при использовании итерационного метода решения уравнения Пуассона, составляет в среднем $t=0,004N$, где $N > 400$ — число узлов разностной сетки.

Помимо основного программного обеспечения, которое может быть использовано и используется на ЕС ЭВМ в ряде организаций, разработан также специализированный пакет программ ТМОМАМ для работы с МАМО ЕС-1055М (см. разд. 2.2). В состав пакета входят модули для решения уравнений переноса (1.6), (1.8) с помощью схем (1.15). Для решения уравнений Пуассона в зависимости от сеточных параметров используются прямые методы ММА и БПФ (см. разд. 1.1) либо явный итерационный метод. Последние два метода опираются на использование «быстрых» команд матричного модуля, что повышает скорость решения задач гидродинамики на сетке с большим числом узлов. Одна из областей эффективного использования пакета программ ТМОМАМ связана с решением задач конвекции при больших числах Рэлея, где необходимость использовать сравнительно небольшой временной шаг позволяет добиться реального ускорения времени расчета (для одного и того же физического времени) до

8 раз по сравнению с основным комплексом. Отметим, что время расчета одного слоя по явной векторизованной схеме меньше времени расчета по основной (неявной) схеме (1.13) в 40—80 раз.

Опыт, полученный при использовании комплекса программ общего назначения для решения различных задач (см. разд. 3.1, 3.2, 4.2, 5.1, 5.2), показал целесообразность создания и других, ориентированных на более конкретные задачи пакетов и комплексов программ с модульной структурой, выполняющих функции расчета, обработки и представления информации и эффективно использующих технические возможности ЭВМ.

6.1.2. Комплекс программ моделирования гидродинамики, тепло- и массообмена при выращивании кристаллов методом Чохральского

Комплекс программ предназначен для параметрических исследований конвективного тепломассообмена в тигле в зависимости от динамических, тепловых воздействий и изменения геометрических характеристик течения с целью оптимизации процесса выращивания кристаллов методом Чохральского. Отличия от комплекса программ общего назначения (см. п. 6.1.1) заключаются в учете особенностей технологического метода, в том числе вращения расплава, неоднородности части границ и разрывов граничных условий (например, для границы кристалл—поверхность расплава). При этом класс задач, решаемых данным комплексом, расширяется за счет возможности исследования вынужденных течений, вызванных вращением кристалла и/или тигля, а также за счет учета совместного действия вынужденной и естественной конвекции. Подобное расширение также реализуется в комплексе программы МКЭ (см. разд. 6.2). Однако применение комплекса на основе МКР более предпочтительно в наиболее важном случае, соответствующем предельным значениям режимных параметров (4.5) при использовании подробных сеточных разбиений (с числом узлов $\sim 10^4$).

Рассматривается движение расплава в цилиндрическом сосуде (тигле) с прямолинейными образующими. Осуществляется численное решение нестационарных уравнений Навье—Стокса совместно с уравнениями переноса тепла и примеси в приближении Буссинеска. Подробные сведения о математической модели, определяющая систему уравнений в (ω, ψ, W) -переменных (4.1), (4.2) и соответствующие граничные условия приведены в п. 4.1.1. Аппроксимация и решение конечно-разностных уравнений осуществляются по схеме, приведенной в разд. 1.1.

В входной структуре данных комплекса задаются параметры технологического процесса в виде безразмерных критериев подобия (чисел Рейнольдса, Грасгофа, Марангони и др.), входящих в критериальную функцию (4.3). Задаются также характеристики границ, граничные условия для искомых функций и сеточные параметры. Результатами являются двумерные поля трех ком-

понент скорости, функций тока и вихря, температуры и концентрации примесей в заданные моменты времени. Возможно уточнение сеточных решений путем сгущения узлов, интерполяции начального приближения и расчета на более подробной сетке. Предусмотрена выдача на печать распределений потоков тепла и примеси вдоль границы, их интегральных значений, пульсационных характеристик колебательных режимов конвекции. Для представления результатов используется табличная печать и графическая система «Динамика» с выводом информации в виде изолиний и графиков на графопостроитель, графический дисплей или АЦПУ (см. разд. 2.2 и 6.5).

Комплекс программ состоит из 24 подпрограмм (примерно 1800 перфокарт) на языке Фортран; возможно проведение расчетов с одинарной и двойной точностью ЕС ЭВМ. Подпрограммы комплекса для случая одинарной точности приведены в табл. 6.2. Модульная организация комплекса программ позволяет разделить решение задачи на следующие этапы: задание начальных данных, вычисление коэффициентов и правых частей конечно-разностных уравнений, задание граничных условий, решение алгебраической системы уравнений, проверка сходимости итерационного процесса, табличная и графическая обработка сеточных решений. Обмен информацией между подпрограммами осуществляется через формальные параметры и частично через общие области оперативной памяти ЭВМ. Выходная структура данных,

Таблица 6.2. Подпрограммы комплекса для моделирования метода Чохральского

№ п/п	Название	Назначение	Количество строк
1	CZOCH	Ввод—вывод данных и управление работой комплекса	258
2	SPNR	Решение уравнений переноса для вихря, окружной скорости, температуры и концентрации примеси	148
3	PUASR	Решение уравнения для функции тока	118
4	PCHR	Расчет массовых сил в уравнении для вихря	20
5	DWR	Определение граничных значений вихря	17
6	CNTR	Контроль решения уравнения для функции тока	29
7	OPTR	Определение оптимального набора итерационных параметров при решении уравнения для функции тока	63
8	TEMPR	Интерполяция экспериментальных распределений температуры на расчетную сетку	9
9	INTER	Интерполяция двумерных полей при переходе на иную сетку	41
10	TABLR	Печать таблиц для двумерного массива чисел	23
11	IZLR	Построение изолиний на алфавитно-цифровом устройстве	119
12	BALR	Расчет интегральных характеристик тепло- и массообмена в области и на границе	75

включающая идентификатор варианта расчета, проблемные и се-точные параметры, искомые сеточные решения, может быть запи-сана на внешние носители (магнитные ленты, диски).

Требуемая оперативная память и время расчета одного шага по времени почти линейно зависят от общего числа узлов сетки. В случае расчетов с одинарной точностью для ЕС-1040 при сетке 31×21 узлов требуется 112 кбайт оперативной памяти и 5 с рас-четного времени на один шаг по времени.

6.2. КОМПЛЕКС ПРОГРАММ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

В данном разделе описывается разработанный комплекс прог-рамм FEMINA (Finite Element Method IN Application), исполь-зующий МКЭ в таких областях вычислительной механики, как задачи гидромеханики, тепло- и массообмена. В отличие от тра-диционных областей применения МКЭ, таких, как строительная механика, механика твердого тела, для которых имеется до-статочно широкий круг комплексов программ (например, [77, 111, 195, 218, 241]), доступные и хорошо отработанные ком-плексы для задач гидромеханики и связанных с ней проблем ограничены.

Реализация МКЭ — неизбежный и трудоемкий этап, и ее эф-фективность является важным фактором для использования ком-плекса на ЭВМ, обладающих ограниченным быстродействием. При разработке комплекса ставилась цель охватить все мно-гообразие формулировок задач гидромеханики, тепло- и массо-обмена (см. разд. 1.1), в том числе стационарные и нестационар-ные задачи естественной и вынужденной конвекции в областях сложной формы, непосредственно связанные с технологией. По-эому комплекс FEMINA построен по модульному принципу, что позволяет быстро перестраивать его на новые задачи. Предпола-гается широкий набор различных типов граничных условий и про-извольная форма расчетной области.

Методы, реализованные в комплексе FEMINA, были апроби-рованы в работе [147] и в дальнейшем получили развитие для более эффективного применения к широкому кругу задач [86, 126, 127, 143, 144, 177].

6.2.1 Основные принципы реализации комплекса FEMINA

В комплексе учтено требование простоты использования, мини-мизации времени пользователя для подготовки данных и поиска ошибок. Были автоматизированы этапы подготовки данных по описанию геометрии области, граничных условий, контроля ошибок и анализа результатов. При выделении основных модулей предполагалось, что процесс решения задачи разделяется на сле-дующие этапы:

1. Описание геометрии области. Генерация сетки конечных элементов. Задание типов границ области и признаков подобластей.

2. Оптимальная перенумерация узлов и элементов сетки с целью уменьшения ширины ленты матрицы или ширины фронта при решении алгебраической системы уравнений.

3. Формулировка задачи, задание граничных и начальных условий. Автоматическая генерация матриц жесткости, массы и вектора правой части алгебраической задачи.

4. Сборка матриц и векторов алгебраической задачи. Решение системы уравнений.

5. Анализ результатов расчетов.

Из них только этап 3 связан непосредственно с формулировкой задачи и только эти модули модифицируются и дополняются при расширении круга задач.

Для связи между модулями зафиксирована структура данных, которая соответствует рекомендациям ассоциации MODULEF для задач МКЭ [253].

Пакет реализован на языке Фортран-IV с использованием принципов структурного программирования и учетом стандарта программирования [253]. Однако в отличие от [253] в FEMINA каждый модуль представляет собой готовую программу, поэтому для решения широкого круга задач от пользователя комплекс не требуется их программирования.

Реализован принцип динамического распределения памяти, что позволяет экономично использовать ресурсы ЭВМ для решения небольших задач без изменения программ. Полный объем пакета — около 10 000 строк исходного текста.

6.2.2. Описание основных модулей комплекса

Автоматизация описания расчетной области и подготовка данных для генерации сетки конечных элементов осуществляется модулем AUGEN. Используются декартовы и полярные системы координат для двумерных областей произвольной геометрической формы. Предварительно область представляется в виде совокупности криволинейных восьмиузловых четырехугольников (суперэлементов (СЭ)); учитываются линии симметрии, если они присутствуют. Основные подпрограммы модуля приведены в табл. 6.3.

Автоматическая генерация сетки осуществляется модулем UNIGEN (табл. 6.4), который разбивает двумерную область произвольной формы на конечные элементы одного из пяти следующих типов: линейные треугольные, четырехугольные прямосторонние и восьмиузловые изопараметрические, шестиузловые треугольные прямосторонние и изопараметрические. Исходная область представляется в виде совокупности криволинейных восьмиузловых четырехугольных подобластей, каждая из которых разбивается на указанное число элементов. Используется

Таблица 6.3. Основные подпрограммы модуля AUGEN

№ п/п	Название	Назначение	Количество строк
1	AUGEN	Управление	200
2	IDATA	Ввод данных	50
3	NEVEN	Генерация локальных номеров СЭ	40
4	PRIELB	Печать данных суперэлемента	30
5	PRIEL	Печать реконструированных данных СЭ	30
6	RECELE	Генерация узлов СЭ	50
7	COOR	Вычисление координат узлов СЭ	45
8	POINT	Поиск или генерация узла	40
9	FILLER	Заполнение вектора для ввода данных	20
10	CHDATA	Определение длины введенных данных	20
11	AOUT	Вывод результатов на печать	50
12	SCALE	Масштабирование и сдвиг сетки СЭ	40
13	GRITRA	Отражение сетки СЭ относительно линии	30
14	REFLE	Отражение точки относительно линии	40
15	GPLOTA	Графический вывод сетки СЭ	300

Таблица 6.4. Основные подпрограммы модуля UNIGEN

№ п/п	Название	Назначение	Количество строк
1	UNIGEN	Управление	300
2	REORDR	Переиумерация СЭ	25
3	MESH	Вывод сгенерированной сетки	300
4	LINEAR	Генерация линейных конечных элементов	85
5	QUAD	Генерация квадратичных конечных элементов	110
6	RENMBR	Формирование таблиц для OPTNUM	55
7	OPTNUM	Оптимальная перенумерация узлов	65
8	OUTPUT	Печать данных о сгенерированной сетке	15
9	GPLOTB	Графический вывод сетки	400
10	WRFTRI	Запись структуры данных для FEMCM	85

простой и эффективный алгоритм, предложенный в [157], с дополнениями и модификациями [147, 211]. Входными данными для модуля UNIGEN являются результаты модуля AUGEN.

Оптимальная перенумерация узлов и элементов сетки выполняется модулем OPTINEL (табл. 6.5). Данные о сетке поступают от модуля UNIGEN. На этом этапе проводится также автоматический контроль топологических ошибок в данных о сетке, таких, как несвязность, которые не были обнаружены ранее. Используется эффективный алгоритм, реализованный в [66].

Формулировку конечно-элементной модели задачи, задание граничных и начальных условий, автоматическое построение ма-

Таблица 6.5. Основные подпрограммы модуля OPTINEL

№ п/п	Название	Назначение	Количество строк
1	OPTINEL	Управление	80
2	OPTIM	Ввод—вывод данных	50
3	ENEIB	Формирование таблиц соседних элементов	45
4	FORMTB	Формирование таблиц для OPTIME	75
5	NEWNON	Перенумерация узлов	85
6	OPTIME	Управление оптимальной перенумерацией	25
7	FORMLV	Формирование уровневой системы графа для заданной корневой вершины	50
8	LEVELE	Поиск концов псевдодиаметра графа, определение оптимальной корневой вершины	275
9	NUMERE	Оптимальная перенумерация вершин	145

триц масс и жесткости, векторов правой части осуществляет модуль FEMCM (табл. 6.6). Его входными данными являются проблемно-зависимые данные о задаче и данные о сетке конечных элементов, подготовленные модулем OPTINEL.

Алгебраическая задача формируется и решается модулем FRONTE (табл. 6.7), реализующим фронтальный метод решения задач МКЭ, развитый на основе программы Худа [230]. Оптимальное значение ширины фронта и, другие необходимые параметры вычисляются модулем OPTINEL.

Анализ результатов расчета выполняется с помощью модуля FEMPLOT, который может использоваться как в пакетном, так и в интерактивном режиме. Результатом его работы является цифровой и графический материал, представляющий значения рассчитанных полей в виде графиков величин и их производных в указанных сечениях области, изолиний и векторных полей скорости и др.

6.2.3. Работа с комплексом FEMINA на ЕС ЭВМ

Для удобства работы с комплексом в операционной системе ЕС ЭВМ вызов любых его этапов организуется с помощью процедуры FEMINA следующим образом.

```
//EXEC:FEMINA, NAME=
:=name, A=, U=, O=, F=, P=
```

Здесь патре (имя задачи) определяет имена входных файлов данных, а последующие параметры задают выполнение соответствующих этапов решения. Если какой-то этап, например генерация сетки, уже выполнен, то соответствующие ему параметры (в данном случае A и U) не указываются. Входным файлом для

Таблица 6.6. Основные подпрограммы модуля FEMCM

№ п/п	Название	Назначение	Количество строк
1	FEMCM	Управление	100
2	REDATA	Ввод параметров сетки	10
3	REDATB	Ввод проблемно-зависимых данных	25
4	REDATC	Ввод данных о сетке	30
5	INIVAL	Задание начальных данных полей скорости, давления, температуры и др.	15
6	NSNOPP	Распределение памяти для алгебраической части. Формирование таблиц и указателей	20
7	NSBCON	Задание граничных условий	35
8	NSEV	Формирование данных для конечного элемента	30
9	NSTOKE	Управление решением нестационарной гидродинамической задачи в переменных V, p	55
10	STRFUN	Вычисление функции тока по полю скоростей	50
11	NST6VP	Вычисление матриц массы, жесткости и вектора правой части элемента в переменных V, p	160
12	SFNST6	Вычисление матрицы жесткости для определения функций тока	20
13	NSIQ2D	Интегрирование по формуле Гаусса на изопараметрическом элементе	110
14	GQNS2D	Интегрирование на прямостороннем элементе	75
15	SACT	Формирование локальных L -координат на элементе	25
16	GQPT	Генерация точек интегрирования Гаусса	40
17	INTB	Интегрирование по стороне элемента	15
18	HF6	Квадратичные базисные функции на шестиузловом треугольном элементе	30
19	HP3	Линейные базисные функции	5
20	DF6DA1	Производные базисных функций по локальной координате ξ	20
21	DF6DA2	То же по η	20
22	DF6DX	Производные базисных функций по x	30
23	DF6DY	То же по y	30
24	NSTECO	Вычисление температурных и концентрационных полей	50
25	NSTCST	Вычисление матриц жесткостей для температуры и концентрации	80
26	GPRINT	Печать полных данных задачи	35
27	NSPRINT	Печать результатов каждой итерации или шага по времени	20
28	NSCONV	Контроль сходимости процесса решения	45
29	WRFTRI	Запись результатов расчета	30
30	WRFTRA	Запись функций тока, температуры, концентрации	15

Таблица 6.7. Подпрограммы модуля FRONTE

№ п/п	Название	Назначение	Количество строк
1	FRONTE	Сборка и лекомпозиция алгебраической задачи фронтальным методом	265
2	BACSBE	Обратная подстановка, получение решения	40
3	RESOLE	Повторное решение задачи с новым вектором правой части	65

AUGEN является файл с именем IAname, для FEMCM—IFname и т. д. При обнаружении ошибки в данных работа комплекса завершается и печатается соответствующая диагностика.

6.3. ПРОГРАММНАЯ ПОДДЕРЖКА МАТРИЧНОГО МОДУЛЯ

В разд. 2.1 были изложены сведения о матричном модуле (МАМО) ЭВМ ЕС-1055М, его возможностях и приведены результаты испытаний на задачах гидромеханики и тепломассообмена.

Широкое применение МАМО в научных исследованиях возможно лишь при наличии систем программирования на языках высокого уровня, прежде всего на Фортране. В стандартном программном обеспечении, поставляемом комбинатом «Роботрон», имеются, однако, лишь макрокоманды для программирования на языке Ассемблер [237]. Построение упомянутых систем на языках высокого уровня представляет самостоятельную и довольно трудоемкую задачу. Наилучшим решением этой проблемы было бы создание системы трансляторов с существующих языков высокого уровня. Однако параллельные и конвейерные процессоры, и в частности МАМО, обладают рядом специфических возможностей, для описания которых в существующих языках нет средств (например, в Фортране нет выразительных средств для описания ряда, хранящегося в индексированном виде для МАМО).

Один из подходов к созданию сравнительно простой в изготавлении системы программирования на языке Фортран для МАМО предложен в Институте проблем механики АН СССР¹. Эта система программирования состоит из системы подпрограмм для запуска отдельных МАМО-команд и подпрограмм редактирования и/или создания блоков параметров, некоторого расширения языка Фортран и предтранслятора, который переводит высказывания на расширенном языке в последовательность вызовов указанных выше подпрограмм.

¹ Программная поддержка матричного модуля разработана А. А. Горбуновым и М. Н. Мякшиной.

Такой подход позволяет полностью использовать все возможности МАМО и все существующие в системе ЕС трансляторы с Фортрана: диалоговые средства отладки в системе СРВ, оптимизирующие трансляторы для создания быстрых программ и т. д.

Ниже, следуя работе [54], описана система подпрограммы для матричного модуля МАМО.

В систему входят 29 МАМО-команд, реализующих ряд вычислительных алгоритмов над объектами-полями, рядами и константами. Это поэлементные арифметические операции над рядами, реорганизация полей, ряд операций матричной алгебры, вычисление полиномов, прямого и обратного преобразования Фурье методом БПФ, некоторые алгоритмы статистического анализа. Каждая МАМО-команда с помощью информации, содержащейся в блоке параметров, может настраиваться по 13 параметрам: характеристики объектов, задание форматов обработки, оптаций и т. д. Если каждый вариант настройки рассматривать как отдельный вариант МАМО-команды, то в общей сложности получается порядка 10^6 команд. Такое разнообразие порождает трудности в реализации систем программирования на языках высокого уровня — создание трансляторов и языков.

Программная поддержка МАМО, разработанная в Институте проблем механики АН СССР [54], имеет в своем составе подпрограммы запуска отдельных МАМО-команд, подпрограммы редактирования блоков параметров, заголовков индексных рядов и полей, управления и учета (измерение количества стартов МАМО-команд, времени работы МАМО и т. д.). Все подпрограммы написаны на языке Ассемблер.

Подпрограммы запуска отдельных МАМО-команд имеют одинаковую структуру и написаны с учетом соглашений о связях по управлению и данным, принятых в системе ЕС. Каждая подпрограмма имеет следующие блоки: сохранение общих регистров вызывающей программы, настройка адресов блока параметров МАМО-команды на адреса фактических параметров, МАМО-команда, вызов системной подпрограммы обработки ошибок при особых случаях в МАМО, восстановление общих регистров и возврат в вызывающую программу, именованные блоки параметров и сообщений. Блоки параметров и сообщений подпрограммы имеют статус именованных общих блоков языка Фортран. Имена подпрограмм, блоков параметров и сообщений имеют следующий вид соответственно: МА XXXX, РВ XXXX, МВ XXXX, где XXXX — мнемонический код МАМО-команды, в большинстве случаев совпадающий с мнемоникой макроМАМО-команд, поставляемых комбинатом «Роботрон». Например, для МАМО-команды ARR (поэлементное сложение ряда с рядом) соответствующие имена имеют вид MAARR, PBARR, MBARR. Длины блоков РВ XXXX — 13 слов, МВ XXXX — 8 слов.

Каждая подпрограмма запускает свою МАМО-команду либо со своим собственным блоком параметров, либо с блоком пара-

метров пользователя. В последнем случае пользователь передает подпрограмме имя созданного им блока в виде дополнительного последнего фактического параметра в операторе вызова. Так, для запуска МАМО-команды ARR со стандартным блоком параметров следует написать оператор вызова в виде CALL MAARR(z, x, y, N), а с пользовательским блоком, помещенным в массив Р(13), — в виде CALL MAARR(z, x, y, N, P).

Стандартные, т. е. находящиеся в телах подпрограмм, блоки параметров имеют следующую настройку: формат работы умножителя — короткий, сумматора — длинный; форматы полей, рядов, констант, участвующих в операциях, — короткие; способ хранения в ОП рядов и полей — неиндексированный; шаги рядов — +1; изменение знаков у операндов перед операцией и у результата после операции — +1 (т. е. знак не изменяется, за исключением двух подпрограмм: MASRR — поэлементное вычитание ряда из ряда и MASCR — вычитание элементов ряда из константы); опция включения тестового устройства — не включена; включено подавление возникновения особого случая в МАМО при исчезновении порядка или потери мантиссы (при этом в качестве результата заносится машинный нуль); адреса защиты, предела подстановок, индекс разделения равны нулю; выход при возникновении особых случаев в МАМО (например, переполнение при арифметических операциях) установлен на системную программу обработки прерываний.

Для изменения настройки стандартных и создания пользовательских блоков параметров в системе предусмотрены подпрограммы MAPAB, MAPRCS и MABRCT. Подпрограмма MAPAB позволяет произвести следующие модификации в стандартном или в создаваемом блоке параметров: установить индекс разделения, заслать адрес защиты, адрес выхода при возникновении особого случая в МАМО, заслать адрес предела для подстановки, изменить форматы данных и работы умножителя и сумматора, способы хранения рядов и полей, шаги рядов, модифицировать изменение знаков операндов, установить оптации и поля их модификаций, модифицировать маскирование некоторых особых случаев в МАМО и условия выхода на программу обработки особых случаев. Информация о необходимых модификациях в блоках параметров задается первой группой параметров подпрограммы — текстовой константой и списком имен переменных. Вторая группа параметров указывает имена блоков параметров, которые необходимо изменять.

Обращение к подпрограмме MAPAB имеет вид

CALL MAPAB('[L1&][L2] * '[, A]...[, P[, Q]]).

Здесь тексты, заключенные в [], обозначают необязательные параметры; $L1$ и $L2$ — литеральные константы, задающие необходимые модификации; & — знак, отделяющий литеральные константы $L1$ и $L2$; * — знак, определяющий конец литеральной константы; A — имена переменных, адреса или значения которых

необходимо занести в блок параметров; P — имя массива, на месте которого создается блок параметров; Q — имя массива, в котором хранится прототип создаваемого блока параметров.

Если в операторе обращения присутствуют фактические параметры, соответствующие P и Q , то перед внесением изменений производится копирование блока Q в блок P . Параметры A в операторе обращения задаются только в том случае, если не пуста часть $L1$ литеральной константы. При этом количество и порядок следования имен типа A должны соответствовать количеству и порядку следования заданных первой частью константы модификаций. Часть $L1$ литеральной константы задает модификации блока параметров, связанные с внесением в блок параметров адресов защиты, предела подстановки и пользовательской программы обработки особых случаев в МАМО, а также с внесением в блок параметров значения индекса, необходимого при поиске элемента с этим индексом в ряде результата (имеет значение при индексированном хранении рядов при включении оптации 4 — поиск компонента ряда результата).

Часть $L2$ литеральной константы задает остальные (из перечисленных выше) модификации, не связанные с адресами или значениями переменных.

Используя подпрограмму МАРАВ, можно изменять стандартные блоки параметров или создавать пользовательские необходимые для реализации алгоритма задачи с помощью МАМО-команд. Изменения отдельных частей блоков параметров, таких, как изменения знаков операндов, задание оптации 2 для поиска экстремума в ряде результата и др., обычно требуются эпизодически для отдельных частей алгоритма. В то же время изменения форматов данных зачастую необходимы глобально для всей программы в целом.

Для того чтобы «автоматизировать» глобальные изменения форматов данных по всей программе в целом, в системе имеются подпрограммы MAPRCS и MABRCT. Подпрограмма MAPRCS имеет один параметр, задающий формат operandов и выполнения умножения и сложения в конвейерах МАМО. Формат задается в виде литеральной константы из одного символа (S — короткий формат, L — длинный, E — расширенный). Подпрограмма MAPRCS «строит» шаблон, с помощью которого затем, при выполнении отдельных подпрограмм системы, могут заменяться отдельные поля стандартных блоков параметров (в частности, относящиеся к форматам данных). Сигнал на необходимость замены этих полей устанавливает подпрограмма MABRCT после ее выполнения. Повторное выполнение подпрограммы MABRCT снимает сигнал необходимости замены. (Однако уже выполненные замещения в стандартных блоках параметров остаются.) Повторное выполнение подпрограммы MABRCT позволяет ускорить выполнение участка подпрограмм, в стандартных блоках которых произошли заданные шаблоном замены.

В созданном подпрограммой MAPRCS шаблоне можно

создать модификации других полей с помощью подпрограммы МАРАВ, если в операторе обращения к ней отсутствуют параметры P и Q .

При работе с индексированными рядами и полями необходимо строить заголовки рядов. При этом в первое слово заголовка ряда необходимо записать адрес оперативной памяти, где фактически хранятся блоки, содержащие индексы и значения его элементов. В языках высокого уровня нет средства для получения адреса переменной или массива. Поэтому в системе предусмотрены подпрограммы, позволяющие заполнить поля переменных или массивов, зарезервированные пользователем под заголовки рядов и полей, адресами памяти, зарезервированной для хранения блоков этих рядов или полей: MAINDV — занесение адреса массива блоков индексированного ряда в его заголовок, MAINDM — подготовка заголовков рядов индексированной матрицы, MARSTI — преобразование вектора или матрицы в индексированный ряд или поле.

В созданной системе подпрограмм не реализована возможность МАМО обрабатывать ряды разной длины. При программировании с использованием МАМО следует иметь в виду, что аппаратура МАМО требует, чтобы на границу двойного слова были установлены адреса блоков параметров, заголовков рядов и массивов, хранящих блоки индексированных рядов полей, адреса защиты и пределов подстановки. Иными словами, в описательной части программы имена этих переменных и массивов необходимо специфицировать оператором REAL*8 или соответствующим образом размещать в именованных общих блоках.

6.4. ПАКЕТ ПРОГРАММ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ ЧИСЛЕННЫХ РЕАЛИЗАЦИЙ

В настоящее время разработано большое число пакетов прикладных программ общего назначения для статистического анализа [250] (BMDP, OSIRIS, SAS, SPSS, СЕПАК, СТАТЕС, ОТЭКС, RANDOM и др.) и специализированных статистических пакетов, учитывающих специфику конкретной физической установки [70]. Несмотря на большое число уже созданных пакетов, которые на 50—90% дублируют друг друга, повторяя программную реализацию одних и тех же алгоритмов статистической обработки, их создание продолжается. Такое положение объясняется, во-первых, трудностями доступа к существующим пакетам, а во-вторых, специальными требованиями к статистическому пакету: набор оцениваемых характеристик, фильтрация данных от искажений конкретной установки, организация работы с базой данных (архивом) и т. п. Созданный в ИПМ АН СССР в составе комплекса программ пакет статистической обработки [23] также имеет свои аналоги [92, 158].

Таблица 6.8. Пакет программ статистической обработки

№ п/п	Название	Назначение	Коли- чество строк	Формат данных	Режим пользования
1	STTSTK	Расчет средних, дисперсии и др. по полям функций тока и температуры (2.14)	155	$\{f_{ij}\}^k$	Пакетный
2	ARSTTT	Расчет средних, дисперсии, средних градиентов любого числового поля (2.14)	90	$\{f_{ij}\}^k$	»
3	TREK	Расчет траекторий (2.24)	44	$\{f_{ij}\}^k$	»
4	TURBD	Расчет характеристик (2.19), (2.22), (2.23)	111	$\{f^k\}_{ij}$	Диалоговый
5	POWTUR	Расчет составляющих баланса турбулентной энергии	130	$\{f_{ij}\}^k$	Пакетный
6	USTAN	Проверка стационарности	91	$\{f^k\}_{ij}$	Диалоговый и пакетный
7	TREND	Устранение тренда, расчет пульсаций	74	$\{f^k\}_{ij}$	То же
8	SPECTR 1	Расчет спектров	33	$\{f^k\}_{ij}$	»
9	WINDOW	Расчет спектрального окна	18	$\{f^k\}_{ij}$	»
10	MEMORY	Реорганизация структуры архивных данных	140	$\{f_{ij}\}^k \rightarrow \rightarrow \{f^k\}_{ij}$	»

В табл. 6.8 приведены основные параметры программ статистической обработки, вошедших в пакет. Указана часть пакета, которая может использоваться в диалоговом режиме в системе «Буер» (см. п. 2.2.2 и разд. 6.5). Программы пакета ориентированы на обработку двух типов исходных данных, организованных в виде файла последовательного доступа $\{f_{ij}\}^k$ и в виде файла прямого доступа $\{f^k\}_{ij}$. Файл последовательного доступа, как правило, хранится на магнитной ленте и получается в результате записи на каждом временном слое полей температуры, функции тока и др. Файл прямого доступа целесообразно организовать, если предполагается обработка в диалоговом режиме. Для этой цели служит программа MEMORY. Общее описание возможностей пакета имеется в работах [22, 23]. Пакет является «открытой» совокупностью программ и допускает расширения, замену отдельных программ в зависимости от конкретной цели обработки. Проблемная ориентация пакета определилась при решении задачи о турбулентном режиме конвекции в вертикальном слое (см. [254] и разд. 3.1), хотя пакет может иметь и более широкое применение.

Основные особенности версии пакета, представленной в табл. 6.8, сводятся к следующему. Во-первых, часть пакета используется в диалоговом режиме. Во-вторых, опыт анализа численных реализаций статистическими методами показал, что алгоритмы статистического анализа должны учитывать специфические особенности численной реализации. Так, например, ана-

лиз стационарности, который в версии пакета, описанной в [22, 23], выполнялся программой SERTST по принятому в статистике критерию серий, выполняется программой USTAN, которая дает возможность наглядно убедиться в устойчивости среднего и, главное, оценить длину интервала осреднения. На основании такого анализа исключается из обработки переходный участок численной реализации, который искажает статистические характеристики развитого квазистационарного (турбулентного) режима.

Процедура выделения турбулентной части реализации широко применяется при так называемой условной обработке [70]. При оценке статистических моментов первого, второго и т. д. порядков применение состоятельных и несмещенных оценок по относительно более сложным формулам не дает ожидаемого преимущества, так как не устраниены другие, более существенные источники погрешностей. Оценка спектра выполняется методом максимальной энтропии (SPECTR1), который специально разработан (см., например, [254]) для коротких временных рядов, а обычно применяемый при обработке физического эксперимента метод усредненных периодограмм, полученных методом БПФ с использованием спектральных окон (WINDOW), сохраняется в пакете для методических исследований.

6.5. ПРОГРАММЫ ГРАФИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ

6.5.1. Графическая система «Динамика»

Как уже упоминалось в п. 2.2.1, программная часть графической системы «Динамика» является расширением комплекса «Графор» [9] и создана для подготовки и вывода графической информации на экраны бытовых телевизоров. В самом комплексе «Графор» модернизации подверглась только подпрограмма GRINIT: в нее добавлена программная секция TVREG, соответствующая именованному общему блоку фортрановских программ, в которой сосредоточена управляющая информация расширенного комплекса «Графор». Кроме того, в программную секцию PLOT этой подпрограммы внесены команды проверки режима работы расширенного комплекса и команды вызова подпрограммы DPLOT.

Расширенный комплекс имеет два режима работы: подготовка рисунков для графопостроителя и подготовка рисунков для графических дисплеев. Управление режимами пользователь осуществляет путем обращения к подпрограммам DINIT и DFIN. Обе подпрограммы без параметров.

Подпрограмма DINIT осуществляет переключение расширенного комплекса на работу с графическими дисплеями. После ее вызова управление из программной секции PLOT передается подпрограмме DPLOT. Кроме переключения, подпрограмма DINIT осуществляет:

а) запоминание состояния некоторых общих блоков комплекса, связанных с аффинными преобразованиями, размером страницы и т. д.;

б) занесение в эти общие блоки информации, соответствующей единичному аффинному преобразованию, и странице размером 10×10 см;

в) выяснение типа устройства, назначенного в операторах DD для задания дисплейного графического файла. При первом выполнении по этой информации DINIT настраивает подпрограмму DPLOT на режимы немедленной или отложенной демонстрации.

В режиме немедленной демонстрации, который осуществляется, если графическому файлу назначен графический дисплей, DPLOT готовит одну или три (для цветных терминалов) карты-бит. В режиме отложенной демонстрации, при назначении графическому файлу магнитного запоминающего устройства (диск или лента) DPLOT готовит информацию в виде следа пера. При этом паре координат вместе с указателем режима перемещения пера отводится 3 байта. Последовательности перемещений с поднятым пером или с рисующим пером, но лежащие на одной прямой при сохранении направления перемещения, заменяются результатирующим перемещением.

Подпрограмма DFIN осуществляет переключение комплекса на режим работы с графопостроителем. При этом управление из программной секции PLOT передается стандартным программам комплекса «Графор» генерации и вывода приказов для графопостроителей, как описано в [9].

Подпрограмма DPLOT имеет те же параметры, что и программа PLOT стандартного комплекса «Графор».

Для вывода подготовленного рисунка на экран графического дисплея, на магнитный носитель или в фоновый массив оперативной памяти служат подпрограммы KADR (черно-белый дисплей) и FRAME. В случае вывода на экран или в фоновый массив подпрограммы могут перед операцией вывода осуществить наложение на подготовленный рисунок рисунка, хранящегося в фоновом массиве. Управление этими возможностями осуществляется значением соответствующего параметра. Другой параметр задает имя фонового массива. Третий параметр задает время демонстрации рисунка на экране.

В случае вывода на магнитный носитель подпрограмма KADR готовит заголовок записи. В заголовок включается информация о необходимости наложения фонового рисунка, направление передачи (на экран или в фоновый массив), время демонстрации, число байт подготовленного следа пера и номер серии, задаваемый четвертым параметром программы KADR. Номер серии имеет значение только при отложенной демонстрации.

Для вывода на экран графического дисплея рисунков, записанных на магнитный носитель, создана подпрограмма KINO.

Параметры подпрограммы указывают на ссылочный номер файла, в который записаны рисунки, имя массива, в который будут читаться записи файла, его размер, имя фонового массива, куда будут переписываться фоновые рисунки, начальный и конечный номера серий, которые следует продемонстрировать. Подпрограмма читает записи файла рисунков, расшифровывает их, готовит карты-бит и переписывает их либо в фоновый массив, либо на экран (с наложением или без наложения фонового рисунка). При этом сначала показываются все рисунки начального номера серии, затем номер серии увеличивается на единицу и, если он находится в заданном интервале номеров серии, показываются все записанные рисунки данной серии и т. д.

С помощью подпрограммы FIXKDR можно нарисовать на графопостроителе рисунок, прочтенный в оперативной памяти из файла отложенной демонстрации. Параметрами подпрограммы являются имя и размер массива, в который прочитан рисунок, и координаты на странице в сантиметрах левого нижнего угла области рисования размером 10×10 см.

Для изменения цвета при работе с цветными дисплеями служит подпрограмма COLOR. Параметр подпрограммы указывает цвет, которым следует далее до нового обращения к ней выполнять рисование.

Для пользователя ЭВМ, знакомого с комплексом «Графор» и желающего выводить рисунки на экран графической дисплейной системы «Динамика», необходимо дополнительно освоить правила пользования подпрограммами DINIT, DFIN, KADR. При работе в режиме отложенной демонстрации, кроме этих подпрограмм, необходимо научиться пользоваться подпрограммами KINO и FIXKDR. В остальном работа с расширенным комплексом «Графор» при выводе рисунков на экраны графических дисплеев ничем не отличается от работы с ним при выводе рисунков на графопостроитель.

6.5.2. Диалоговая проблемно-ориентированная графическая система «Буер»

Диалоговая проблемно-ориентированная графическая система «Буер» (см. п. 2.2.2) предназначена для автоматизации научных исследований в части представления и вывода графической информации при проведении численного моделирования. Система ориентирована в первую очередь на использование для обработки численных реализаций сеточных задач тепло- и массообмена, но может успешно применяться и для других задач с дискретным представлением решения, в том числе решаемых методами конечных элементов. Помимо собственно диалоговой системы, система «Буер» представляет собой набор средств, обеспечивающих последовательный вывод графической информации на различные графические устройства, обслуживаемые пакетом прикладных программ «Графор», предусмотренные как разработчи-

Таблица 6.9. Пакет программ «Буер». Минимальный состав

№ п/п	Название	Назначение	Количество строк
1	BUER	Головная программа, выбор режимов работы, видов обработки	160
2	READML	Считывание записей численных реализаций	185
3	GRAF 1	Диалоговая надстройка к программам построения графиков	125
4	IZOL 2	То же к программам построения проекции поверхностей, заданных функциями двух перемен	85
5	LOOK 3	То же к программам построения проекции изоповерхностей, заданных функциями трех переменных	55
6	REDCTR	Редактирование графического изображения	40
7	DIALGO	Вывод изображения в векторном или растровом виде на графические устройства	160
8	WRNAME, WRPARM, WRCMNT, WRMS	Запись решения во внешнюю память в стандарте системы	90
9	RDNAME, RDPARM, RDCMNT, RDMS	Считывание решения из внешней памяти в стандарте системы	130

ком, так и пользователем. Графический пакет «Атом'85» [94], реализованный в графическом стандарте, близком к международному стандарту GKS, функционирует совместно с пакетами «Графор» и «Динамика» [50], используя общие с ними драйверы связи с графическими устройствами. Система «Буер» является открытой. В ней предусмотрен выход на программы, подготовленные пользователем, благодаря чему функции системы могут быть легко расширены самим пользователем.

Головная программа BUER диалоговой системы «Буер» (табл. 6.9) обеспечивает инициализацию работы системы, в том числе организацию при необходимости архива данных для последующей статистической обработки (подпрограмма MEMORY), выбор режимов работы и обращение по главному «меню функций» к основным возможностям системы: считыванию данных (подпрограмма READML), проблемно-ориентированной обработке (подпрограммы SPECTR 1, USTAN, TURBD и др.), построению графиков (GRAF1), изолиний (IZOL2), проекций поверхностей (LOOK2), заданных функцией двух переменных, проекций изоповерхностей (LOOK3), заданных функцией трех переменных, редактированию изображения (REDCTR) и выводу графического изображения (DIALGO) на одно из предусмотренных в системе графических устройств.

Система «Буер» включает пакет программ для записи (WRNAME, WRPARM, WRCMNT, WRMS) и считывания (RDNAME, RDPARM, RDCMNT, RDMS) информации о решении сеточных задач в стандартизованном виде, который, помимо ци-

фровых данных, содержит сведения об имени и типе задачи, имена и значения параметров задачи, комментарии.

Подпрограмма READML управляет считыванием данных из файла, содержащего численную реализацию (магнитный диск или лента), осуществляя подвод к нужной записи, считывание записи в необходимом формате, возврат к началу файла.

Подпрограммы GRAF1, IZOL2, LOOK2 и LOOK3 являются специализированными диалоговыми надстройками над программами построения графиков, изолиний, проекций поверхностей и изоповерхностей соответственно. В процессе диалога пользователь с указанными надстройками происходит выбор масштабов, построение координатных осей, нанесение маркеров, экстремумов, значений или номеров изолиний, управление координатами точки зрения, возможно перемещение участков изображения, наложение изображений с экранированием и др.

Подпрограмма REDCTR служит для редактирования готового кадра графической информации: нанесения надписей, изменения масштаба и положения частей рисунка.

Подпрограмма DIALGO осуществляет вывод графического изображения в векторном или растровом виде последовательно на устройства, выбираемые пользователем в процессе диалога. При переводе вывода на очередное устройство подпрограмма DIALGO осуществляет динамическую перенастройку вывода, инициализацию управляющих блоков, выбор драйвера устройства и необходимых программ открытия и закрытия страницы. Система «Буэр» использует технические и программные средства графической системы «Динамика» [50] для вывода информации на черно-белые и цветные телевизоры или мониторы и устройства мозаичной печати для вывода «твердой копии» изображения. Обеспечивается вывод на графопостроитель EC7051—EC7054, EC7907, устройство вывода цветного графического изображения на кинофотопленку СОМ-340 и в архив графических данных на внешней памяти.

Система «Буэр» предназначена для функционирования в режиме разделения времени (PPB) ОС ЕС [18] и подсистеме диалоговой обработки системы виртуальных машин [159].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Преследуя в качестве основной цели изложение в одной книге всех этапов математического моделирования на основе уравнений Навье—Стокса, а также результатов решения отдельных физических задач, мы не смогли остановиться сколько-нибудь подробно на достижениях в этой области других авторов, сведения о которых можно найти, например, в книгах [11, 12, 123, 168, 190, 205, 252, 264], а также в необозримом море журнальных статей. В цитированных книгах чаще всего излагаются методы численного решения и в различной степени подробности физические результаты, а вопросы ускорения расчетов, обработки данных и сведения о специальном математическом обеспечении отсутствуют или освещены фрагментарно, причем во многих случаях неясно, применимы ли они или применялись к соответствующему классу задач.

Отметим, что наиболее полно последний круг вопросов освещен в работах, относящихся к применению метода конечных элементов, отличающегося значительно большей технологичностью, чем метод конечных разностей, и постепенно завоевывающего при использовании супер-ЭВМ всю территорию применения методов математического моделирования в механике вязкой жидкости и задачах тепломассообмена¹.

В связи с тем, что рассматриваемые в данной книге расчеты выполнены на ЕС ЭВМ, имеющих среднюю производительность, метод конечных элементов мог применяться нами лишь в тех случаях, когда возникали трудности в использовании более экономичных схем метода конечных разностей (область сложной формы). Однако отмечавшийся в гл. 2 прогресс в развитии эффективных итерационных методов, по-видимому, уже в ближайшее время может привести к широкому применению МКЭ и для данного типа ЕС ЭВМ. С другой стороны, в опубликованной литературе можно найти схемы МКР, которые для отдельных задач более эффективны, чем те, которыми мы пользовались. Однако мы стремились во всех случаях не прибегать без необходимости к применению слишком громоздких схем, требующих большого времени на программирование и отработку, ограничиваясь модификацией приведенного в гл. 1 класса схем.

¹ См обзор. В. И. Полежаева, А. И. Простомолотова и А. И. Федосеева «Метод конечных элементов в механике вязкой жидкости» (Итоги науки и техники. Механика жидкости и газа. М.. ВИНТИ 1987. Т 21)

Главный результат методических исследований, рассмотренных в книге, состоит в том, что, используя наиболее эффективные и неоднократно модифицированные схемы, приспособленные к соответствующим классам задач, и средства конвейерной обработки, удалось даже на ЕС ЭВМ типа 1040—1055, 1055М численно решать двумерные нестационарные уравнения Навье—Стокса в приближении Буссинеска на сетках до $2 \cdot 10^4$ узлов. Это позволило в отдельных случаях рассчитывать режимы естественной конвекции при числах Рэлея, отнесенных к разности температур, до 10^9 — 10^{11} или отнесенных к потоку тепла — до 10^{11} — 10^{13} . В этом диапазоне чисел Рэлея наблюдаемые в физическом эксперименте режимы конвекции являются переходными или турбулентными, что близко соответствует параметрам многих реальных процессов.

У нас не было возможности осуществить формальную проверку точности полученных в этих режимах численных решений путем существенного уменьшения пространственного шага сетки, однако в результате прямого сопоставления с данными физического эксперимента и выполненных многочисленных расчетов при различных числах Рэлея и пространственных шагах сетки получены сведения о влиянии этих параметров на локальные и интегральные характеристики конвекции, представляющие практический интерес (например, на средние потоки тепла и массы, неравномерность распределения местных потоков тепла и массы и соответствующую им структуру конвекции, расслоение по температуре или концентрации, вызываемое конвекцией, масштабы слоистых структур и многие другие характеристики, рассмотренные в гл. 3—5 настоящей книги). На основании совокупности сведений об указанных практически важных характеристиках удается делать те или иные выводы, например, о возможности управления процессом при изменении соответствующих параметров с последующей проверкой этих выводов в натурных условиях. Заметим, что такого рода выводы обычно имеют качественный характер, т. е. они дают указание тенденции, направления протекания процесса. Следует отметить, что на практике точный расчет невозможен, поскольку многие физические факторы, например физические свойства, граничные условия сопряжения, достаточно строго не определены.

Таким образом, получаемые на пределе возможностей существующих ЭВМ численные решения нестационарных уравнений Навье—Стокса при режимных параметрах, близких к реальным, могут давать значительный практический эффект, но пока еще мало используются. Именно поэтому авторы книги приложили значительные усилия для описания инструмента исследования с тем, чтобы ускорить его применение, учитывая, что затраты на необходимое для этого математическое обеспечение составляют несколько десятков человеко-лет. Вместе с тем нельзя не признать, что чтение столь разнородного по характеру материала может представить трудности, в связи с чем на следую-

щих этапах, возможно, будет целесообразно раздельное изложение методов расчета, программного обеспечения и результатов решения этого класса задач. В связи с этим отметим, что анализ результатов численных решений уравнений Навье—Стокса еще мало продвинут; ему уделено недостаточно места и в настоящей книге.

Математическое моделирование на основе уравнений Навье—Стокса опирается на фундамент многих теоретических исследований [4, 5, 33, 38, 99], связь которых с приведенными здесь численными результатами, по-видимому, могла быть более полной. В дальнейшем представляет интерес выделить граници существования режимов внутренних волн в задаче п. 5.2, а также исследовать поведение нестационарных нерегулярных решений уравнений Навье—Стокса (см. разд. 2, п. 3.1, 3.3) с позиций теории динамических систем с тем, чтобы выделить граници существования так называемых странных аттракторов и других характеристик динамической системы (см., например, [38]). Важное значение имеет также анализ устойчивости ряда численно реализованных режимов, в том числе построение более полных карт линейной устойчивости в задачах, где основное течение не является плоско-параллельным, что само по себе представляет серьезную проблему, также требующую значительного объема вычислительной работы. Упомянутые вопросы, выходящие за рамки книги, являются предметом дальнейших исследований.

Полученные в книге методические и конкретные физические результаты по гидромеханике и тепломассообмену при выращивании кристаллов составляют основу одного из наиболее важных направлений технологической гидромеханики, относящегося к получению материалов электронной техники, и имеют большое значение для развития других ее направлений, например, металлургии, получения стекол полимерных материалов, разделения веществ, в которых на качество материала и производительность процесса оказывают влияние конвекция, тепло- и массообмен².

² Авдуевский В. С., Ишилинский А. Ю., Полежаев В. И. Гидромеханика и тепломассообмен при получении материалов. Научное сообщение//Вестн. АН СССР. 1987. № 6.

ЛИТЕРАТУРА

1. Авдуевский В. С., Агафонов М. С., Гришин С. Д. и др. Экспериментальные исследования по гидромеханике в условиях невесомости//Изв. АН СССР. Сер. физ. 1985. Т. 49, № 4. С. 681—686
- 2 Адамсон А Физическая химия поверхностей М. Мир, 1979. 568 с
3. Атабаев С. Ч., Плахотный В. П., Полежаев В. И. и др Комплекс программ FEMINA Примеры применения МКЭ для решения задач теории упругости и гидродинамики//ИПМ АН СССР. М., 1986. 40 с. Деп. в ВИНИТИ 26 03 86. № 2037—В 86.
- 4 Баренблат Г. И. Основы численного анализа. М.: Наука, 1986. 744 с
- 5 Баренблат Г. И. Подобие, автомодельность, промежуточная асимптотика. Теория и приложения к геофизической гидродинамике. Л.: Гидрометеоиздат, 1982. 256 с
- 6 Баренблат Г. И., Бенилов А. Ю Закономерности проникающей турбулентной конвекции в стратифицированной жидкости//Океанология 1983. Т. 23, вып. 5. С. 743—752.
- 7 Бармин И. В., Безденежных Н. А., Брискман В. А. и др. Программа экспериментов на установке для исследования гидродинамических явлений в условиях невесомости//Изв АН СССР Сер. физ. 1985. Т. 49, № 4. С. 698—707
- 8 Бахвалов Н С О сходимости одного релаксационного метода//Журн. вычисл. математики и мат. физики 1966 Т. 6, № 5 С. 861—883
9. Баяковский Ю. М., Галактионов В. А., Михайлова Т. Н Графор Графическое расширение форTRANа М. Наука, 1985. 288 с
- 10 Беленький С. З., Фраудин Е. С Теория турбулентного перемешивания//Тр ФИАН 1965 Т. 29 С. 207—238.
11. Белоцерковский О. М. Прямое численное моделирование «переходных» течений газа и задач турбулентности. М., 1978. 72 с.
12. Белоцерковский О. М Численное моделирование в механике сплошных сред М. Наука, 1984. 519 с
- 13 Бердиников В. С., Борисов В. Л., Панченко В. И. Экспериментальное моделирование гидродинамики и теплообмена при выращивании монокристаллов методом Чохральского //Теплофизические явления при кристаллизации металлов Новосибирск Ин-т теплофизики СО АН СССР, 1982. С. 77—92
- 14 Бердиников В. С., Полежаев В. И., Простомолов А. И. Течение вязкой жидкости в цилиндрическом сосуде при вращении диска//Изв АН СССР. МЖГ 1985 № 5 С. 33—40
- 15 Библиотека программ для решения сеточных уравнений/Под ред. Е. С. Николаева М. Изд-во МГУ, 1984. 160 с
- 16 Бирюк Р. В. О термокапиллярной конвекции//ЖПМТФ 1966. № 3. С. 69—72
- 17 Борис С. Д., Люблев Е. А., Журавков И. Н МОРTRAN Руководство для пользователей по работе с препроцессором MORTRAN-2 Препр ИТЭФ № 101 М., 1983. 45 с
- 18 Брич З. С., Капилевич Д. В., Терехова О. Г Программирование на Фортране ЕС ЭВМ в режиме разделения времени. М. Финансы и статистика, 1982. 192 с
19. Булгаков Н. П Возникновение свободной конвекции в верхнем слое океана//Изв. АН СССР ФАО 1972. Т. 8, № 7. С. 777—780.

20. Бунэ А. В., Гинзбург А. И., Полежаев В. И., Федоров К. Н. Численное и лабораторное моделирование развития конвекции в охлаждающемся с поверхности слое воды//Изв. АН СССР. ФАО. 1985 Т 21, № 9. С 956—963.
21. Бунэ А. В., Грязнов В. Л. Обработка научной информации с помощью графопостроителя. Препр. ИПМ АН СССР № 135. М., 1979. 66 с.
22. Бунэ А. В., Грязнов В. Л., Дубовик К. Г., Полежаев В. И. Комплекс прикладных программ для моделирования процессов гидродинамики, тепло- и массообмена на основе нестационарных уравнений Навье—Стокса//Пакеты прикладных программ Вычислительный эксперимент. М.: Наука, 1983. С. 70—85.
23. Бунэ А. В., Грязнов В. Л., Дубовик К. Г., Полежаев В. И. Методика и комплекс программ численного моделирования гидродинамических процессов на основе нестационарных уравнений Навье—Стокса: Препр. ИПМ АН СССР № 173. М., 1981. 70 с.
24. Бунэ А. В., Дикарев С. И., Зацепин А. Г., Тишаев Д. В. Пример численного и лабораторного моделирования процесса развития конвекции//Изв АН СССР ФАО 1985 Т 21, № 8 С 892—895.
25. Бунэ А. В., Дубовик К. Г., Полежаев В. И., Федюшкин А. И. Тесты и модификации конечно-разностных схем для двумерных уравнений Навье—Стокса Препр ИПМ АН СССР № 260. М., 1985. 60 с.
26. Вальциферов Ю. В., Дронов В. П. Численное исследование естественной конвекции в тонкостенном цилиндрическом сосуде с полусферическими днищами, полностью заполненном жидкостью//Изв. АН СССР МЖГ 1984 № 5 С. 204—208
27. Вальциферов Ю. В., Полежаев В. И. К расчету конвективного теплообмена и температурного расслоения в цилиндрическом сосуде при заданном потоке тепла//Численное моделирование в механике сплошных сред¹. Новосибирск: ИТПМ СО АН СССР. 1981. Т. 12, № 1. С 10—19.
28. Вальциферов Ю. В., Полежаев В. И. Конвективный теплообмен в замкнутом осесимметричном сосуде с криволинейной образующей при наличии поверхности раздела фаз и фазовых переходов//Изв АН СССР. МЖГ. 1975. № 6. С 126—134
29. Варфоломеев А. А., Сутырин Г. Г. Лабораторное моделирование свободной нестационарной проникающей конвекции//ДАН СССР 1981 Т 261 № 1. С 55—59
30. Верезуб Н. А., Зубрицкая И. Н., Егоров А. В. и др. Исследование особенностей получения некоторых полупроводниковых систем на установке «Сплав»//Изв АН СССР Сер физ. 1985 Т. 49, № 4. С. 687—690
31. Верезуб Н. А., Копелиович Э. С., Полежаев В. И., Раков В. В. Особенности процессов тепломассообмена в расплавах некоторых элементарных полупроводников и соединений типа A^3B^5 в условиях невесомости//Технологические эксперименты в невесомости Свердловск УНЦ АН СССР, 1983 С 79—94
32. Верезуб Н. А., Полежаев В. И. Математическое моделирование конвекции и концентрационных полей при росте эпитаксиальных слоев//Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур. М.: Наука, 1986 С 101—112
33. Вишнук М. И., Фурсиков А. В. Математические задачи статистической гидромеханики. М.: Наука, 1980. 440 с.
34. Влит, Лайю. Экспериментальное исследование турбулентных пограничных слоев в условиях естественной конвекции//Теплопередача. 1969. № 4 С 73—96
35. Волконская Т. Г., Пасконов В. М., Росляков Г. С., Шустова М. Н. Пакет прикладных программ «ГАММА» по аэродинамике М. Изд во МГУ, 1985. 178 с.
36. Воронов И. Н., Гришин В. П., Полежаев В. И. и др. Влияние гидродинамики на распределение кислорода при выращивании монокристаллов

¹ Далее ЧММСС.

- кремния большого диаметра методом Чохральского//Теплофизика кристаллизации веществ и материалов Новосибирск. Ин-т теплофизики СО АН СССР, 1986, с. 40—53.
37. Воропаев С. И., Гаврилов Б. Л., Зацепин А. Г., Федоров К. Н. Лабораторное исследование проникающей конвекции в охлаждаемой с поверхности стратифицированной жидкости//Исследование изменчивости физических процессов в океане. М: Ин-т океанологии АН СССР, 1978. С. 100—111.
 38. Гапонов-Грехов А. В., Рабинович М. И. Нелинейная физика. Стохастичность и структуры//Физика XX века. Развитие и перспективы. М. Наука, 1984. С. 219—280
 39. Герценштейн С. Я., Чернявский В. М О нелинейном развитии двумерных и трехмерных возмущений при неустойчивости Рэлея—Тейлора//Изв. АН СССР МЖГ 1985 № 2. С. 38—46.
 40. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М Конвективная устойчивость//Итоги науки и техники. Механика жидкости и газа. М ВИНИТИ, 1978. Т. 11. С. 66—154
 41. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
 42. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М О медленных течениях вязкой жидкости в замкнутой области//Учен. зап. Пермского ун-та. Гидродинамика. 1970. Вып. 2 С. 207—217.
 43. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М. О теплопередаче через вертикальную щель прямоугольного сечения при сильной конвекции//Инж-фiz. журн. 1960 Т. 3, № 12. С. 63—67.
 44. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М., Мызников В. М Об устойчивости плоскопараллельного конвективного течения жидкости в горизонтальном слое//ЖПМТФ 1974. № 1 С. 95—100.
 45. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. Н., Тарунин Е. Л Численное исследование конвективного движения в замкнутой полости//Изв. АН СССР. МЖГ. 1966. № 5 С. 56—62
 46. Гидромеханика и процессы переоса в невесомости. Свердловск. УНЦ АН СССР, 1983 167 с.
 47. Гидромеханика и тепломассообмен в невесомости. М: Наука, 1982. 263 с
 48. Гинзбург А. И., Голицын Г. С., Федоров К. И. Измерения временного масштаба конвекции жидкости при ее остыvании с поверхности//Изв. АН СССР. ФАО. 1979 Т. 15, № 3. С. 333—335.
 49. Гинзбург А. И., Федоров К. Н Охлаждение воды с поверхности при свободной и вынужденной конвекции//Изв АН СССР. ФАО. 1978. Т. 14, № 1 С. 79—87
 50. Глушко Г. С., Гореликов С. Х., Ермаков М. К и др. Графическая дисплейная система «Динамика» для ЕС ЭВМ//ПТЭ 1985. № 4. С. 232—233.
 51. Годунов С. К., Рябенский В. С Введение в теорию разностных схем. М. Физматгиз, 1962. 340 с.
 52. Голицын Г. С. Исследование конвекции с геофизическими приложениями и аналогиями Л. Гидрометеоиздат. 1980. 56 с.
 53. Голицын Г. С., Грачев А. А. Скорости и тепломассообмен при конвекции в двухкомпонентной среде//ДАН СССР. 1980. Т. 255, № 3. С. 548.
 54. Горбунов А. А., Мякишина М. Н., Чудов Л. А. Программирование для матричного модуля МАМО на языке ФОРТРАН Препр. ИПМ АН СССР № 279. М, 1986. 67 с
 55. Грязнов В. Л. Некоторые вопросы численного моделирования двойной диффузии//Проблемы динамики вязкой жидкости. Новосибирск. ИТПМ СО АН СССР 1985 С. 113—116.
 56. Грязнов В. Л Теоретическое исследование теплообмена в приповерхностном слое воды//Проблемы изучения и исследования водных ресурсов. М. Ин-т водных проблем АН СССР. 1979 С. 19—25.
 57. Грязнов В. Л., Дубовик К. Г., Никитин С. А. и др. Применение методов численного моделирования в космической технологии//Космическая технология и материаловедение. М. Наука. 1982. С. 39—48.

58. Грязнов В. Л., Полежаев В. И. Исследование некоторых разностных схем и аппроксимаций граничных условий для численного решения уравнений тепловой конвекции: Препр. ИПМ АН СССР № 40. М., 1974. 66 с.
59. Грязнов В. Л., Полежаев В. И. Структура и режимы тепловой конвекции в вертикальном слое//Проблемы динамики вязкой жидкости. Новосибирск ИТПМ СО АН СССР. 1985. С. 117—120
60. Грязнов В. Л., Полежаев В. И. Численное моделирование турбулентного режима конвекции в вертикальном слое//Изв АН СССР МЖГ. 1977 № 5. С. 8—15.
61. Грязнов В. Л., Полежаев В. И. Численное решение нестационарных уравнений Навье—Стокса для турбулентного режима естественной конвекции: Препр. ИПМ АН СССР № 81. М., 1977. 56 с.
62. Грязнов В. Л., Полежаев В. И. Численное решение уравнений Навье—Стокса для турбулентной конвекции в вертикальном слое//Математические модели течений жидкости. Новосибирск ИТПМ СО АН СССР, 1978 С. 114—123
63. Дайковский А. Г., Полежаев В. И., Федосеев А. И. Исследование структуры переходного и турбулентного режимов конвекции в вертикальном слое//Изв АН СССР МЖГ. 1978 № 6. С. 66—75.
64. Дайковский А. Г., Полежаев В. И., Федосеев А. И. Численное моделирование переходного и турбулентного режимов конвекции на основе нестационарных уравнений Навье—Стокса Препр. ИПМ АН СССР № 101. М., 1978. 65 с.
65. Дайковский А. Г., Полежаев В. И., Федосеев А. И. Применение метода конечных элементов в механике вязкой жидкости//ЧММСС. 1980 Т 11, № 1. С. 37—50.
66. Дайковский А. Г., Португалов Ю. И., Федосеев А. И. Минимизация ширины ленты матрицы в МКЭ Препр. ИФВЭ № 80-152 Серпухов, 1980 14 с.
67. Дащевский М. Я. О связи поверхностных свойств антимонида галлия с процессами роста легированных кристаллов этого соединения//Поверхностные явления в расплавах Киев Наук думка, 1968. С. 73—84
68. Джалаурия И. Естественная конвекция М. Мир, 1983. 400 с.
69. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений М: Мир, 1984 336 с.
70. Дрюкова Э. В. Статистическая обработка результатов весовых тензометрических измерений в аэродинамической трубе//Тр. ЦАГИ 1982. Вып 2139 С. 31—42
71. Дубовик К. Г. Параметрическое исследование термокапиллярной конвекции//II Всесоюз. семинар по гидромеханике невесомости Тез. докл. Пермь Изд-во УНЦ АН СССР, 1981 С. 51.
72. Дубовик К. Г. Численное моделирование взаимодействия термокапиллярной и естественной конвекций, термокапиллярной и капиллярно-концентрационной конвекции//III Всесоюз семинар по гидромеханике и тепло-массообмену в невесомости Тез. докл. Черноголовка: ИФТТ АН СССР, 1983
73. Дубовик К. Г., Полежаев В. И. Термокапиллярная конвекция в квадратной области//ИПМ АН СССР. М., 1986. 29 с. Деп. в ВИНИТИ. 25 02 86, № 1290—В86
74. Ермаков М. К., Кузеванова Ж. И., Поляков Е. Н. Опыт использования пакета прикладных программ «Графор» для нестандартных графических устройств Препр ИПФ АН СССР № 139 Горький, 1986 15 с.
75. Жовнир Г. Й., Марончук И. Е. Процессы массопереноса при получении эпитаксиальных структур соединений A^3B^5 из жидкой фазы//Автометрия. 1980 № 6 С. 22—32
76. Захаренков М. Н. Аппроксимация граничного условия для завихренности на поверхности твердого тела при решении уравнений Навье—Стокса в переменных функциях тока и завихренности//ЧММСС 1980 Т 11, № 7. С. 56—74
77. Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике М. Мир, 1975 541 с.
78. Зилитинкевич С. С., Реснянский Ю. Д., Чаликов Д. В. Теоретическое

- моделирование верхнего слоя океана//Итоги науки и техники. М.: ВИНИТИ, 1978 Т. 12 С 5—51
- 79 Зимин В. Д. Оптическая обработка информации в теневых приборах. Пермь Перм. ун-т, 1977. 40 с.
- 80 Казарян В. А., Мызников Б. И., Непомнящий А. А. и др. Численное исследование конвективного теплообмена при хранении жидкых углеводородов в подземных емкостях//Изв. АН СССР. МЖГ. 1981. № 2. С 143—148
- 81 Казимиров В. Н., Князев С. Н., Полежаев В. И. и др. Исследование тепловой и вынужденной конвекции в расплаве при выращивании монокристаллов ГГГ большого диаметра методом Чохральского//Теплофизика кристаллизации веществ и материалов Новосибирск Ин-т теплофиз. СО АН СССР, 1986. С. 30—40
- 82 Казимиров В. Н., Князев С. Н., Полежаев В. И. и др. Опыт применения математического моделирования для процессов роста кристаллов//Современные вопросы информатики, вычислительной техники и автоматизации. М: ВИНИТИ, 1985 С 33
83. Калацкий В. И. Моделирование вертикальной термической структуры деятельного слоя океана. Л: Гидрометеоиздат. 1978 216 с.
- 84 Канасевич Э. Р Анализ временных последовательностей в геофизике. М: Недра, 1985 400 с
85. Капорин И. Е. Модифицированный маршрут алгоритм решения разностной задачи Дирихле для уравнений Пауссона в прямоугольнике//Разностные методы математической физики. М.: Изд-во МГУ, 1980. С. 11—21.
86. Касиева В. А., Касиев М. С., Kochin В. Н., Федосеев А. И. Пакет программ MULTIMODE для расчета спектров частот осесимметричных и продольно-однородных электромагнитных резонаторов методом конечных элементов. Препр ИФВЭ № 82—92. Серпухов, 1982 23 с.
87. Кирдяшин А. Г. Термокапиллярная и термогравитационная конвекция в горизонтальном слое жидкости//Гидромеханика и процессы переноса в невесомости Свердловск: УНЦ АН СССР, 1983. С. 126—135.
88. Кирдяшин А. Г., Семенов В. И., Бердников В. С., Гапонов В. А. Структура температурного поля в вертикальном слое при тепловой гравитационной конвекции//Теплофизика высоких температур. 1982. Т 20, № 5. С. 922—928.
89. Клейн И. С., Полежаев В. И Конвективный теплообмен в проницаемых пористых средах Препр. ИПМ АН СССР № 111. М., 1978. 66 с.
90. Кнут Д. Искусство программирования на ЭВМ. Т. 2 Получисленные алгоритмы М: Мир, 1977 726 с
91. Корнеев В. Г. Схемы метода конечных элементов высоких порядков точности. Л: Изд-во ЛГУ, 1977. 236 с.
92. Котов Ю. Б. Процедуры анализа данных в архиве ЭДА, использующие статистические критерии Препр ИПМ АН СССР № 119. М, 1985. 20 с
93. Кочергин В. П., Сухоруков В. А., Цветова В. А. Моделирование процессов вертикальной турбулентной диффузии в океане//Численные методы расчета океанических течений в океане. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1974. С 129—152
94. Kochin В. Н., Самарин А. В Графический пакет «Атом'84» Функциональная характеристика Препр ИФВЭ № 95-137 Серпухов, 1985. 32 с
95. Krauze Г. Матричный модуль для ЕС-1055 и области его применения// Вычислительная техника социалистических стран М: Финансы и статистика, 1981 Вып 10
96. Кузнецова Ю. А. Блочно-релаксационные методы в подпространствах, их оптимизация и применение//Вычислительные методы в прикладной математике. Новосибирск: Наука, 1982. С. 119—143.
97. Кутателадзе С. С. Пристенная турбулентность. Новосибирск: Наука, 1973. 227 с
98. Кутателадзе С. С., Ивакин В. П., Кирдяшин А. Г., Кекалов А. Н Турбулентная естественная конвекция в вертикальном слое//Теплофизика высоких температур 1977. Т. 15. № 3. С. 545—553.

99. Ладыженская О. А. Математические вопросы динамики вязкой несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1970. 288 с.
100. Ландау Л. Д., Лишиц Е. М. Механика сплошных сред. М.: Наука, 1986. 736 с.
101. Литвин А. А., Марончук И. Е. Особенности выращивания эпикаксиальных слоев из ограниченного объема раствора—расплава//Кристаллография. 1977. Т. 22, вып. 2. С. 425—428.
102. Лодиз Р., Паркер Р. Рост монокристаллов. М.: Мир, 1974. 540 с.
103. Люмкис Е. Д., Мартузан Б. Я., Мартузане Э. Н. Взаимодействие потоков, вызванных термокапиллярной конвекцией и вращением при зонной плавке, и их влияние на распределение примеси//Технологические эксперименты в невесомости. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1983. С. 163—178.
104. Люмкис Е. Д., Мартузан Б. Я., Мартузане Э. Н. Численные исследования нестационарных гидродинамических и тепловых процессов в методе Чохральского//Изв. АН СССР. Сер. физ. 1980. № 2. С. 373—377.
105. Ляпидевский В. Ю. Параметризация процессов перемешивания в неоднородной жидкости//Нелинейные проблемы теории поверхностных и внутренних волн. Новосибирск: Наука, 1985. С. 127—164.
106. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1980. 535 с.
107. Марчук Г. И., Агошков В. И. Введение в проекционно-сеточные методы. М.: Наука, 1981. 416 с.
108. Мильвицкий М. Г., Пелевин О. В., Сахаров В. А. Физико-химические основы получения разлагающихся полупроводниковых соединений. М.: Металлургия, 1974. 392 с.
109. Монин А. С., Красицкий В. П. Явления на поверхности океана. Л.: Гидрометеоиздат, 1985. 376 с.
110. Монин А. С., Яглом А. М. Статистическая гидромеханика. М.: Наука, 1965. Ч. 1. 639 с.
111. Морозов Е. М., Никишков Г. П. Метод конечных элементов в механике разрушения. М.: Наука, 1980. 254 с.
112. Мызникова Б. И., Тарунин Е. Л. О граничных условиях для вихря скорости в задачах динамики вязкой жидкости//Конвективные течения и гидродинамическая устойчивость. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1979. С. 90—101.
113. Некрасов В. Н., Попов В. А., Чашечкин Ю. Д. Формирование периодической структуры конвективного течения при боковом нагреве стратифицированной жидкости//Изв. АН СССР. ФАО. 1976. Т. 12, № 11. С. 1191—1200.
114. Непомнящий А. А. О нестационарных вторичных конвективных движениях в вертикальном плоском слое//Конвективные течения. Пермь: ПГПИ, 1979. С. 61—66.
115. Неуважаев В. Е., Яковлев В. Г. Выход на автомодельный режим в задаче о турбулентном перемешивании двух слоев несжимаемой жидкости в постоянном поле силы тяжести//ЧММСС. 1980. Т. 11, № 3. С. 127—131.
116. Нишелер П. П., Краус Э. Б. Одномерные модели верхнего слоя океана//Моделирование и прогноз верхних слоев океана. Л.: Гидрометеоиздат, 1979. С. 175—208.
117. Никитин С. А., Полежаев В. И., Федюшкин А. И. Конвекция и распределение примеси в кристаллах при направленной кристаллизации//Технологические эксперименты в невесомости. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1983. С. 140—150.
118. Ньюэлл, Шмидт. Теплоотдача при ламинарной естественной конвекции в прямоугольной замкнутой полости//Теплопередача. 1970. Т. 92, № 1. С. 106—117.
119. Оганесян Л. А., Ривкинд В. Я., Руховец Л. А. Вариационно-разностные методы решения эллиптических уравнений//Тр. семинара. Вильнюс: Ин-т физики и математики АН ЛитССР, 1973. Т. 8, вып. 5.
120. Онянов В. А., Тарунин Е. Л. Численные эксперименты по использованию различных разностных схем для задач свободной конвекции в замкнутой области//Учен. зап. Перм. ун-та. Гидродинамика. 1975. № 327. С. 156—181.

121. Острак С. Роль конвекции в технологических процессах, проводимых в условиях микрогравитации//Космическая технология/Под ред. Л. Стега. М.: Мир, 1980. С. 6—19.
122. Пасконов В. М., Полежаев В. И., Чудов Л. А. Численное моделирование процессов тепло- и массообмена. М.: Наука, 1984. 288 с.
123. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат, 1984. 150 с.
124. Петренко И. И., Пуртов С. В., Федосеев А. И. Решение больших задач МКЭ многосеточным методом. Алгоритм с разбиением на подобласти: Препр. ИФВЭ № 86-200. Серпухов, 1986. 16 с.
125. Плавление, кристаллизация и фазообразование в невесомости. М.: Наука, 1979. 256 с.
126. Плахотный В. П., Полежаев В. И., Простомолотов А. И. и др. Комплекс программ FEMINA: Программная реализация МКЭ для ЕС ЭВМ/ИПМ АН СССР. М., 1986. 76 с. Деп. в ВИНИТИ. 04.03.86, № 1448—В 86.
127. Плахотный В. П., Полежаев В. И., Простомолотов А. И., Федосеев А. И. Комплекс программ FEMINA: Формулировка уравнений МКЭ в задачах механики сплошных сред/ИПМ АН СССР. М., 1986. 65 с. Деп. в ВИНИТИ. 04.03.86, № 1447—В 86.
128. Полежаев В. И. Гидромеханика и тепломассообмен при выращивании кристаллов//Итоги науки и техники. Механика жидкости и газа. М.: ВИНИТИ, 1984. Т. 18. С. 198—268.
129. Полежаев В. И. Численное исследование естественной конвекции жидкостей и газов//Некоторые применения метода сеток в газовой динамике. М.: Изд-во МГУ, 1971. Вып. 4. С. 86—180.
130. Полежаев В. И. Исследование процессов конвективного тепло- и массообмена на основе уравнений Навье—Стокса//Школа-семинар социалистических стран «Вычислительная аэрогидродинамика». Тез. докл. Самарканд, 1985.
131. Полежаев В. И. Исследования тепломассообмена в невесомости//Изв. АН СССР. Сер. физ. 1985. Т. 49, № 4. С. 635—642.
132. Полежаев В. И. Конвективное взаимодействие в цилиндрическом сосуде, частично заполненном жидкостью, при подводе тепла к боковой и свободной поверхности и дну//Изв. АН СССР. МЖГ. 1972. № 4. С. 77—88.
133. Полежаев В. И. Локальные естественно-конвективные процессы в геофизической гидродинамике//Методы гидрофизических исследований. Горький: ИПФ АН СССР, 1984. С. 74—91.
134. Полежаев В. И. Нестационарная ламинарная тепловая конвекция в замкнутой области при постоянном подводе тепла//Изв. АН СССР. МЖГ. 1970. № 4. С. 109—117.
135. Полежаев В. И. О влиянии сжимаемости газа на течение и перенос тепла при естественной конвекции//Там же. 1968. № 6. С. 97—102.
136. Полежаев В. И. Термокапиллярная конвекция жидкости в цилиндрическом сосуде при заданном подводе тепла//Некоторые применения метода сеток в газовой динамике. М.: Изд-во МГУ, 1971. Вып. 3. С. 175—213.
137. Полежаев В. И. Течение и теплопередача при ламинарной естественной конвекции в вертикальном слое//Тепло- и массоперенос. Минск, 1968. Т. 1. С. 631—640.
138. Полежаев В. И. Эффект максимума температурного расслоения и его приложения//ДАН СССР. 1974. Т. 218, № 4. С. 783—786.
139. Полежаев В. И., Вальциферов Ю. В. Численное исследование нестационарной тепловой конвекции в цилиндрическом сосуде при боковом подводе тепла//Некоторые применения метода сеток в газовой динамике. М.: Изд-во МГУ, 1971. Вып. 3. С. 137—174.
140. Полежаев В. И., Верезуб Н. А. Численное исследование процесса жидкостной эпилаксии в условиях невесомости//Гагаринские научные чтения по космонавтике и авиации, 1983, 1984. М.: Наука, 1985. С. 235—239.
141. Полежаев В. И., Власюк М. П. О ячейковой конвекции в бесконечно длинном горизонтальном слое газа, подогреваемом снизу//ДАН СССР. 1970. Т. 195, № 5. С. 1058—1061.
142. Полежаев В. И., Грязнов В. Л. Метод расчета граничных условий для

- уравнений Навье—Стокса в переменных «вихрь, функция тока»//Там же. 1974. Т. 219, № 2. С. 301—304.
143. Полежаев В. И., Грязнов В. Л., Дайковский А. Г., Федосеев А. И. Численные методы турбулентной конвекции на основе нестационарных уравнений Навье—Стокса//Численные методы динамики вязкой жидкости. Новосибирск: ИТПМ СО АН СССР, 1979. С. 154—159.
144. Полежаев В. И., Плахотный В. П., Простомолотов А. И., Федосеев А. И. Применение МКЭ в задачах гидродинамики и теории упругости//Гр. Х Всесоюз. школы по динамике вязкой жидкости. Новосибирск: ИТПМ СО АН СССР, 1984. С. 249—255.
145. Полежаев В. И., Простомолотов А. И. Исследование процессов гидродинамики и тепломассообмена при выращивании кристаллов методом Чохральского//Изв. АН СССР. МЖГ. 1981. № 1. С. 55—65.
146. Полежаев В. И., Простомолотов А. И. Численное исследование гидродинамики, тепло- и массообмена в модели роста кристаллов по Чохральскому//Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур. М.: Наука, 1986. С. 66—76.
147. Полежаев В. И., Федосеев А. И. Метод конечных элементов в задачах гидромеханики, тепло- и массообмена: Препр. ИПМ АН СССР № 160. М., 1980. 72 с.
148. Полежаев В. И., Федюшин А. И. Гидродинамические эффекты концентрационного расслоения в замкнутых объемах//Изв. АН СССР. МЖГ. 1980. № 3. С. 11—18.
149. Полежаев В. И., Черкасов С. Г. Нестационарная тепловая конвекция в цилиндрическом сосуде при боковом подводе тепла//Там же. 1983. № 4. С. 148—157.
150. Простомолотов А. И. Численное исследование механизмов распределения примесей при нормальной и пониженной гравитации в методе Чохральского//III Всесоюз. семинар по гидромеханике и тепломассообмену в невесомости: Тез. докл. Черноголовка: ИФТТ АН СССР, 1984. С. 204—206.
151. Простомолотов А. И., Простомолотова И. И. Численное исследование течений вязкой вращающейся жидкости методом конечных элементов//ИПМ АН СССР. М., 1984. 65 с. Деп. в ВИНИТИ. 03.05.1984, № 2884—84.
152. Радиационно-фотохимические модели климата/ Под ред. И. Л. Кароля. Л.: Гидрометеоиздат, 1986. 192 с.
153. Рождественский Б. Л., Левитан Ю. Л., Моисеенко Б. Д. и др. О методах численного моделирования турбулентных течений несжимаемой вязкой жидкости: Препр. ИПМ АН СССР № 14. М., 1979. 20 с.
154. Рождественский Б. Л., Моисеенко Б. Д., Сидорова В. К. Условия численного моделирования предельных режимов течений вязкой жидкости: Препр. ИПМ АН СССР № 24. М., 1973. 38 с.
155. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980. 616 с.
156. Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. 552 с.
157. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. М.: Мир, 1979. 392 с.
158. Сергин В. Я., Александров В. В. Статистический анализ численной модели атмосферы Минца — Аракавы//Численные эксперименты по динамике глобального климата. Владивосток: Тихоокеан. ин-т географии ДВНЦ АН СССР, 1982. С. 18—23.
159. Система виртуальных машин для ЕС ЭВМ: Справ./ И. М. Булко, Н. Н. Дорожко, Л. И. Дудкин и др.; Под ред. Э. В. Ковалевича. М.: Финансы и статистика, 1985. 360 с.
160. Смирнов В. А., Старшинова И. В., Фрязинов И. В. Анализ распределения кислорода в расплаве кремния//Кристаллография. 1984. Т. 29, № 3. С. 560—566.
161. Соловьев А. В., Вершинский Н. А. О тонкой термической структуре поверхности слоя океана//ДАН СССР. 1978. Т. 240, № 5. С. 1066—1069.
162. Степченков В. Н., Голубенков Б. Ю. Исследование тепловых условий и конвективных потоков в расплавах кремния большой массы//Электронная техника. Материалы. 1982. Вып. 6 (167). С. 44—47.

163. Степченков В. Н., Голубенков Б. Ю., добрынин А. В. Исследование вынужденной конвекции в расплавах кремния большой массы//Электронная техника. Материалы. 1982. Вып. 7 (168). С. 25—28.
164. Стрельченко С. С., Лебедев В. В. Соединения А³В⁵: Справ. М.: Металлургия, 1984. 144 с.
165. Стрэн Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. М.: Мир, 1977. 349 с.
166. Тарунин Е. Л. О выборе аппроксимационной формулы для вихря скорости на твердой границе при решении задач динамики вязкой жидкости//ЧММСС. 1978. Т. 9, № 7. С. 97—111.
167. Тарунин Е. Л., Шайдуров В. Г., Шарифуллин А. Н. Экспериментальное и численное исследование устойчивости замкнутого конвективного пограничного слоя// Конвективные течения и гидродинамическая устойчивость. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1979. С. 3—16.
168. Тернер Дж. Эффекты плавучести в жидкости. М.: Мир, 1977. 431 с.
169. Технологические эксперименты в невесомости. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1983. 180 с.
170. Том А., Эйпл К. Числовые расчеты полей в технике и физике. М.: Энергия, 1964. 208 с.
171. Федоренко Р. П. Итерационные методы решения разностных эллиптических уравнений//УМН. 1973. Вып. 2. С. 121—182.
172. Федоренко Р. П. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений//Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1961. Т. 1, № 5. С. 922—927.
173. Федоров К. Н. О физической структуре приповерхностного слоя океана//Метеорология и гидрология. 1981. № 10. С. 58—66.
174. Федоров К. Н. Тонкая термохалинная структура вод океана. М.: Гидрометеоиздат, 1976. 184 с.
175. Федоровський О. Д., Никифорович Є. І. Гідротермодинаміка приповерхневого шару рідини і оптичні методи її дослідження//Вісн. АН УРСР. 1984. № 11. С. 15—21.
176. Федосеев А. И. Повышение эффективности метода конечных элементов для решения задач механики сплошных сред//Аннот. докл. VI Всесоюз. съезда по теоретической и прикладной механике. Ташкент, 1986. С. 669.
177. Федосеев А. И. Решение некоторых задач механики сплошных сред методом конечных элементов: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. 01.02.05. М.: ИПМ АН СССР, 1980.
178. Фоли Дж., Дэм А. ван. Основы интерактивной машинной графики: В 2 т. М.: Мир, 1985. Т. 1—2.
179. Фромм Дж. Численное изучение конвекции в потоках, движущихся в закрытых помещениях//Численные методы в механике жидкостей. М.: Мир, 1973. С. 289—299.
180. Хунжура Г. Г., Андреев Е. Г. Экспериментальные исследования теплообмена между морем и атмосферой при мелкомасштабном взаимодействии//Изв. АН СССР. ФАО. 1974. Т. 10, № 10. С. 1110—1112.
181. Центральный процессор EC-2655 2003. Описание команд. Dresden: VEB Robotron. Zentrum für Forschung und Technik, 1983.
182. Черкасов С. Г. Естественная конвекция в вертикальном цилиндрическом сосуде при подводе тепла к боковой и свободной поверхностям//Изв. АН СССР. МЖГ. 1984. № 6. С. 51—56.
183. Черкасов С. Г. Квазистационарный режим естественной конвекции в вертикальном цилиндрическом сосуде//Там же. 1986. № 1. С. 146—152.
184. Черкасов С. Г. Метод локального численного моделирования для расчета естественной конвекции в вертикальном цилиндрическом сосуде//ЧММСС. 1984. Т. 16, № 3. С. 153—166.
185. Черкасов С. Г. Модифицированный численный метод для расчета тепловой конвекции в вертикальном цилиндрическом сосуде//Там же. Т. 15, № 5 С 144—153
186. Черноуско Ю. Л. Экспериментальные исследования микроконвекции в лабораторных условиях//Изв. АН СССР. ФАО 1971. Т. 7, № 10 С. 1096—1098.

187. Численные эксперименты по динамике глобального климата. Владивосток: ДВНЦ АН СССР, 1982. 144 с.
188. Шашков Ю. М. Выращивание монокристаллов методом вытягивания. М.: Металлургия, 1982. 312 с.
189. Эмери, Чу. Теплопередача через вертикальный слой жидкости//Теплопередача. 1965. № 1. С. 132—140.
190. Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967. 195 с.
191. Arakawa A. Computational design for long-term numerical integration of the equations of fluid motion: Two-dimensional incompressible flow//J. Comput. Phys. 1966. Vol. 1. N 1. P. 119—143.
192. Bar-Yoseph P., Blech J. S., Solan A. Finite element solution of the Navier-Stokes equations in rotating flow//Intern. J. Numer. Meth. Eng. 1981. Vol. 17. P. 1123—1146.
193. Baracat H. Z., Clark J. A. Analytical and experimental study of the transient laminar natural convection flows in partially filled liquid containers// Proc. 3rd Intern. Heat Transfer Conf. Chicago, 1966. Vol. 2. P. 152—162.
194. Batchelor G. K. Heat transfer by free convection across a closed cavity between vertical boundaries at different temperatures//Quart. Appl. Math. 1954. Vol. 12, N 3. P. 209—233.
195. Bathe K. J., Wilson E. L., Peterson F. E. SAP-IV — a structural analysis program for static and dynamic response of linear systems//Rep. EERC 73—11. Berkeley: Univ. Cal., 1973.
196. Behnia M., Viskanta R. Free convection in thermally stratified water cooled from above//Intern. J. Heat and Mass Transfer. 1979. Vol. 22, N 4. P. 611—623.
197. Bettys P. L., Haslam J. C., Lidder J. S. Comparison of four computer programs for two-dimensional convection in closed cells//Numerical methods in thermal problems/Ed. R. W. Lewis, K. Morgan. Swansea, 1979. P. 243—255.
198. Bolton E. W., Busse F. H. Stability of convection rolls in a layer with stress-free boundaries//J. Fluid Mech. 1985. Vol. 150. P. 487—498.
199. Bontoux P., Gilly B., Roux B. Natural convection in cavities for high Rayleigh numbers//Proc. 3rd GAMM Conf. Numer. Meth. Fluid Mech. Notes on numerical fluid mechanics/Ed. E. H. Hirschel. Braunschweig; Wiesbaden: Vieweg, 1979. Vol. 2, P. 22—35.
200. Burggraf O. R. Analytical and numerical studies of the structure of steady separated flows//J. Fluid Mech. 1966. Vol. 24, N 1. P. 115—168.
201. Burton J. A., Prim R. C., Slichter W. P. The distribution of solute in crystal grown from the melt. Part I: Theoretical//J. Chem. Phys. 1953. Vol. 21. P. 1987—1990.
202. Camel D., Favier J. J. Thermal convection and longitudinal macrosegregation in horizontal Bridgman crystal growth. I: Order of magnitude analysis//J. Cryst. Growth. 1984. Vol. 67. P. 42—56.
203. Camel D., Favier J. J. Thermal convection and longitudinal macrosegregation in horizontal Bridgman crystal growth. II: Practical laws//Ibid. P. 57—65.
204. Carruthers J. R. Flow transitions and interface shape in Czochralski growth of oxide crystals//Ibid. 1976. Vol. 36. P. 212—214.
205. Cebeci T., Bradshaw P. Physical and computational aspects of convective heat transfer. N. Y. etc.: Springer, 1984.
206. Chang E., Wilcox W. Inhomogeneities due to thermocapillary flow in floating zone melting//J. Cryst. Growth. 1975. Vol. 28. P. 8—12.
207. Chang-Maten I., Bankoff S. G. Nonlinear Taylor instability in a cylindrical vessel//Trans. ASME. J. Fluids Eng. 1984. Vol. 106, N 4. P. 380—384.
208. Chen C. F., Briggs D. G., Wirtz R. A. Stability of thermal convection in a salinity gradient due to lateral heating//Intern. J. Heat and Mass Transfer. 1971. Vol. 14. P. 279—288.
209. Chung Ch.-H. Experiments on steady and oscillatory temperature distribution in a floating zone due to the Marangoni convection//Acta astronaut. 1980. Vol. 7, N 4/5. P. 479—488.

210. *Clark P. A., Wilcox W. R.* Influence of gravity on thermocapillary convection in floating zone melting of silicon//*J. Cryst. Growth.* 1980. Vol. 50. P. 461—469.
211. *Durocher L. L., Gasper A.* A versatile two-dimentional mesh generator with automatic bandwith reduction//*Comput. and Struct.* 1979. Vol. 10. P. 561—575.
212. *Eckert E. R. G., Carlson W. O.* Natural convection in an air layer enclosed between two vertical plates with different temperatures//*Intern. J. Heat and Mass Transfer.* 1961. Vol. 2. P. 106—120.
213. *Elder J. W.* Laminar free convection in a vertical slot//*J. Fluid Mech.* 1965. Vol. 23, N 1. P. 77—98.
214. *Elider J. W.* Turbulent free convection in vertical slot//*Ibid.* P. 99—111.
215. *Elder J. W.* Numerical experiments with free convection in a vertical slot//*Ibid.* 1966. Vol. 24, N 4. P. 823—843.
216. *Evans L. B., Reid R. C., Drake E. M.* Transient natural convection in a vertical cylinder//*AIChE Journal.* 1968. Vol. 14, N 2. P. 251—259.
217. *Faller A. J., Cartwright R. W.* Laboratory studies of Langmuir circulations//*J. Phys. Oceanogr.* 1983. Vol. 13, N 2. P. 329—340.
218. Finite element systems: A handbook. 2nd ed./Ed. C. A. Brebbia. Berlin: Springer, 1982. 498 p.
219. *Foster T. D.* Onset on convection in a layer of fluid cooled from above//*Phys. Fluid.* 1965. Vol. 8, N 10. P. 1770—1774.
220. *Foster T. D., Waller S.* Experiments on convection at very high Rayleigh numbers//*Ibid.* 1985. Vol. 28, N 2. P. 455—461.
221. *Grötzbach G.* Spatial resolution requirements for direct numerical simulation of the Rayleigh-Benard convection//*J. Comput. Phys.* 1983. Vol. 49. P. 241—264.
222. *Grötzbach G.* The direct numerical simulation of laminar and turbulent Benard convection//*J. Fluid Mech.* 1982. Vol. 119. P. 27—53.
223. *Haines D. A., Smith M. C.* Wind tunnel generation of horizontal roll vortices over a differentially heated surface//*Nature.* 1983. Vol. 306, N 5941. P. 351—352.
224. *Hart J. E.* On sideways diffusive instability//*J. Fluid Mech.* 1971. Vol. 49, N 2. P. 279—288.
225. *Hart J. E.* Stability of the flow in a differentially heated inclined box//*Ibid.* Vol. 47, N 3. P. 548—576.
226. *Hart J. E.* A note on the stability of low-Prandtl number Hadley circulations//*Ibid.* 1983. Vol. 135. P. 271.
227. *Hart J. E.* Low-Prandtl number convection between differentially heated end walls//*Intern. J. Heat and Mass Transfer.* 1983. Vol. 26, N 7. P. 1069—1074.
228. *Heitz W. L., Westwater J. W.* Critical Rayleigh numbers for natural convection of water confined in square cells with L/D from 0,5 to 8//*Trans. ASME. J. Heat Transfer.* 1971. N 5. P. 188—196.
229. *Hess C. F., Miller C. W.* Natural convection in a vertical cylinder subject to constant heat flux//*Intern. J. Heat and Mass Transfer.* 1979. Vol. 22, N 3. P. 421—430.
230. *Hood P.* Frontal solution program for unsymmetric matrixies//*Intern. J. Numer. Meth. Eng.* 1976. Vol. 10. P. 37.
231. *Huntley S. C.* Temperature-pressure-time relations in closed cryogenic containers//*Adv. Cryog. Eng.* 1960. Vol. 3. P. 342.
232. *Hurle D. T. J., Jakeman E. J., Pike E. R.* On the solution of the Benard problem with boundaries of finite conductivity//*Proc. Roy. Soc. London A.* 1967. Vol. 296, N 1447. P. 469—475.
233. *Imberger J.* The diurnal mixed layer//*Limnol. Oceanogr.* 1985. Vol. 30, N 4. P. 737—770.
234. *Jannat M., Mazeas C.* Étude expérimentale de la convection naturelle dans des cellules rectangulaires verticales//*Intern. J. Heat and Mass Transfer.* 1973. Vol. 16. P. 81—100.
235. *Katsaros K. B., Shaw W. J., Drummond K.* Laboratory experiments on the interaction between surface waves and free convection in water//*Turbu*

- lent fluxes through the sea surface, wave dynamics and prediction//Ed. A. Favies, K. Hasselmann. 1979. P. 289—305.
236. Kobayashi N. Hydrodynamics on Czochralski growth: Computer analysis and experiments//*J. Cryst. Growth*. 1982. Vol. 52. P. 425—434.
 237. Köhler G., Wildenhein F. D. Basis Programmierung des Matrixmoduls der EC2655/EC2655M. Dresden: VEB Robotron-Elektronik, 1985.
 238. Kutateladze S. S., Kirdyashkin A. G., Ivakin V. P. Turbulent natural convection on a vertical plate in a vertical layer//*Intern. J. Heat and Mass Transfer*. 1972. Vol. 15, N 2. P. 193—202.
 239. Langlois W. E. Effect of the buoyancy parametry on Czochralski bulk flow in garnet growth//*J. Cryst. Growth*. 1979. Vol. 46. P. 743—746.
 240. Lee Y., Korpela S. A. Multicellular natural convection in a vertical slot//*J. Fluid Mech.* 1983. Vol. 126. P. 91—121.
 241. Mackerle J. Review of general pre- and post-processor programs for the finite element applications//*Adv. Eng. Software*. 1983. Vol. 5, N 3. P. 148—159.
 242. Mateika D. Czochralski growth double container technique//*J. Cryst. Growth*. 1983. Vol. 65. P. 237—242.
 243. Mull W., Reicher H. Warmeschute durch Luftschichten Gesundheits//Zugener wess. Beih. 1930. Bd. 28, N 1. S. 1—28.
 244. Multigrid methods: Proc. Köln-Porz, 1981/Ed. W. Hackbush, U. Trottenberg. Springer, 1982. (Lect. Notes Math.; Vol. 960).
 245. Nagata M., Busse F. H. Three-dimensional tertiary motions in a plane shear layer//*J. Fluid Mech.* 1983. Vol. 135. P. 1—26.
 246. Napolitano L. G. Surface and buoyancy driven free convection//*Acta astronaut.* 1982. Vol. 9, N 4. P. 199—215.
 247. Narusawa U., Suzukiwa Y. Experimental study of double-diffusive cellular convection due to an uniform lateral heat flux//*J. Fluid Mech.* 1981. Vol. 113. P. 387—405.
 248. Ogura Y., Kondo H. A. linear stability of convective motion in a thermally unstable layer below a stable region//*J. Meteorol. Soc. Jap. Ser. II*. 1970. Vol. 48, N 3. P. 204—215.
 249. Orszag S. A., Israeli M. Numerical simulation of viscous incompressible flows//*Annu. Rev. Fluid Mech.* 1974. Vol. 6. P. 281—318.
 250. Package reports//*Comput. Statist. and Data Anal.* 1983, Vol. 1, N 1. P. 53—65.
 251. Pao H. P. Numerical solution of the Navier-Stokes equation for flows in the disk-cylinder system//*Phys. Fluids*. 1972. Vol. 15, N 1. P. 4—11.
 252. Peyret R., Taylor T. D. Computational methods for fluid flow. N. Y. etc.: Springer, 1983. Рус. пер.: Пейре Р., Тейлор Т. Д. Вычислительные методы в задачах механики жидкости. Л.: Гидрометиздат, 1986. 352 с.
 253. Perronnet A. Description des structures des données du club modulef// MODULEF. Chesney: IRIA. Févr. 1979.
 254. Polezhaev V. I., Bune A. V., Griaznov V. L. Structure, characteristics of transition and of turbulence in the thermal convection given by the direct numerical modelling//*Laminar-turbulent transition*/Ed. V. V. Kozlov. Berlin: Springer, 1985. P. 741—747.
 255. Polezhaev V. I., Dubovik K. G., Nikitin S. A. et al. Convection during crystal growth on Earth and in Space//*J. Cryst. Growth*. 1981. Vol. 52, N 1. P. 465—470.
 256. Polezhaev V. I., Griaznov V. L., Daykovsky A. G., Fedoseev A. I. Numerical models of turbulent convection based on the unsteady Navier-Stokes equations//*Proc. VI Intern. Conf. Numer. Meth. Fluid Dynam.* Tbilisi, 1978/ Ed. H. Cabannes. B.: Springer, 1978. P. 454—459. (Lect. Notes Phys.; Vol. 90).
 257. Preisser F., Schwabe D., Scharmann A. Steady and oscillatory thermocapillary convection in liquid columns with free cylindrical surface//*J. Fluid Mech.* 1983. Vol. 126. P. 545—567.
 258. Qureshi Z. H., Gebhart B. Transition and transport in a buoyancy driven flow in water adjacent to a vertical uniform flux surface//*Intern. J. Heat and Mass Transfer*. 1978. Vol. 21, N 12. P. 1467—1479.

259. Rosenblat S., Davis S. H., Homsy G. M. Nonlinear Marangoni convection in bounded layers//J. Fluid Mech. 1982. Vol. 120. P. 91—144.
260. Schultz D. H. Numerical solution for the flow of a fluid in a heated closed cavity//Quart. J. Mech. and Appl. Math. 1973. Vol. 26, pt. 2. P. 173—192.
261. Segel J. A. Distant sidewalls cause slow amplitude modulation of cellular convection//J. Fluid Mech. 1969. Vol. 38. P. 203—224.
262. Seki N., Fukusako S., Inaba H. Visual observation of natural convective flow in a narrow vertical cavity//Ibid. 1978. Vol. 84, pt 4. P. 695—704.
263. Sen A. K., Davis S. H. Steady thermocapillary flows in two-dimensional slots//Ibid. 1982. Vol. 121. P. 163—186.
264. Shih T. M. Numerical heat transfer. N. Y.: Hemisphere Publ. Corp., 1984. 563 p.
265. Smith M. K., Davis S. H. Instabilities of dynamic thermocapillary liquid layers. Part 1: Convective instabilities//J. Fluid Mech. 1983. Vol. 132. P. 119—144.
266. Snider D. M., Viskanta R. Radiation induced thermal stratification in surface layers of stagnant water//Trans. ASME. C. J. Heat Transfer. 1975. N 1. P. 35—40.
267. Spangenberg W. G., Rowland W. R. Convective circulation in water induced by evaporative cooling//Phys. Fluids. 1961. Vol. 4, N 6. P. 743—750.
268. Sparrow E. M., Goldstein R. J., Jonsson V. K. Thermal instability in a horizontal fluid layer: effect of boundary conditions and non-linear temperature profile//J. Fluid Mech. 1964. Vol. 18, N 4. P. 513.
269. Tanaka H., Miyata H. Turbulent natural convection in a horizontal water layer heated from below//Intern. J. Heat and Mass Transfer. 1980. Vol. 23. P. 1273—1281.
270. Thorpe J. A., Hutt P. K., Soulsby R. The effect of horizontal gradients on thermohaline convection//J. Fluid Mech. 1969. Vol. 38, pt 2. P. 375—400.
271. Townsend A. A. Internal waves produced by a convective layer//Ibid. 1966. Vol. 24, pt. 2. P. 307—319.
272. Turner J. S., Chen C. F. Two-dimensional effects in double-diffusive convection//Ibid. 1974. Vol. 63, pt 3. P. 577—592.
273. Vahl Davis G. De. Natural convection of air in a square cavity: a benchmark numerical solution//Int. J. for numerical methods in fluids. 1983. Vol. 3, N 3. P. 249—264.
274. Wesseling P., Sonneveld P. Numerical experiment with a multiple grid and a preconditioned Lanczos type methods//Approximation methods for Navier—Stokes problems/Ed. R. Rautman. Berlin etc., 1980. P. 543—562. (Lect. Notes. Math.; Vol. 771).
275. White E. A. D., Wood J. D. C. Heat and mass transfer in LPE processes//J. Gryst. Growth. 1972. Vol. 17. P. 315—321.
276. Whitehead J. A., Chen M. M. Thermal instability and convection of a thin fluid layer bounded by a stably stratified region//J. Fluid Mech. 1970. Vol. 40, pt 3. P. 549—576.
277. Yin S. H., Wung T. V., Chen K. Natural convection in an air layer enclosed with rectangular cavities//Intern. J. Heat and Mass Transfer. 1978. Vol. 21, N 3. P. 307—315.
278. Zebib A., Homsy G. M., Meiburg E. High Marangoni number convection in a square cavity//Phys. Fluids. 1985. Vol. 28, N 12. P. 3467—3476.
279. Zienkiewicz O. C. The finite element method. N. Y.: McGraw-Hill, 1977. 787 p.
280. Zulehner W., Huber D. Czochralski-grown silicon//Crystals-growth: Properties and applications. Berlin etc.: Springer, 1982. P. 1—144.

ОГЛАВЛЕНИЕ

От редактора	3
Предисловие	6
Глава 1. МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ—СТОКСА	11
Введение. Математическая модель конвекции, тепло- и массообмена	11
1.1. Метод конечных разностей	18
1.1.1. Общая структура основной конечно-разностной схемы	18
1.1.2. Сеточные аппроксимации уравнений вихря и переноса	21
1.1.3. Решение уравнения для функции тока	31
1.1.4. Аппроксимация граничных условий для вихря	35
1.1.5. Тесты конечно-разностных схем на нестационарных задачах	41
1.2. Метод конечных элементов	48
1.2.1. Подход к построению уравнений МКЭ и аппроксимация граничных условий	49
1.2.2. Составление уравнений конечных элементов	53
1.2.3. Решение систем алгебраических уравнений МКЭ	55
1.2.4. Генерация конечно-элементной сетки	56
1.2.5. Уравнения Навье—Стокса в приближении Буссинеска	57
1.2.6. Тесты МКЭ — течение несжимаемой жидкости в полости с движущейся границей	61
1.2.7. Тесты тепловой конвекции в замкнутой области, подогреваемой сбоку	62
Глава 2 УСКОРЕНИЕ РАСЧЕТОВ И ОБРАБОТКА ЧИСЛЕННЫХ РЕАЛИЗАЦИЙ	66
2.1. Конвейерная обработка данных. Применение матричного модуля ЭВМ ЕС-1055М в задачах конвективного тепло- и массообмена	67
2.1.1. Ускорение счета в конвейерных вычислителях	67
2.1.2. Общая характеристика матричного модуля ЭВМ ЕС-1055М	72
2.1.3. Эффективность МАМО в задачах тепло- и массообмена	76
2.2. Графическая обработка численных реализаций	81
2.2.1. Графическая система «Динамика»	82
2.2.2. Диалоговая проблемно-ориентированная графическая обработка численных реализаций	85
2.3. Статистическая обработка численных реализаций	87
Глава 3. ТЕПЛОВАЯ КОНВЕКЦИЯ В ЗАМКНУТЫХ ПЛОСКИХ ОБЛАСТИХ И СОСУДАХ	93
3.1. Тепловая гравитационная конвекция в вертикальном слое	94
3.1.1. Математическая модель	96

3.1.2	Структура и режимы течения	97
3.1.3.	Зависимость суммарного потока тепла и других интегральных характеристик от чисел Рэлея, Прандтля и отношения сторон слоя	101
3.1.4	Локальные характеристики конвекции	105
3.1.5.	Нестационарные ламинарный и турбулентный режимы	108
3.2.	Капиллярная конвекция в плоских областях	112
3.2.1.	Математическая модель	113
3.2.2.	Термокапиллярная конвекция в прямоугольных каналах	114
3.2.3.	Взаимодействие термокапиллярной и капиллярно-концентрационной конвекций	127
3.3.	Тепловая гравитационная конвекция в вертикальных цилиндрических сосудах	132
3.3.1.	Влияние конвекции на тепловой режим хранения жидкостей в сосудах	132
3.3.2.	Математическая модель и режимы тепловой гравитационной конвекции	133
3.3.3.	Квазистационарный режим конвекции	137
3.3.4.	Нестационарные режимы ламинарной конвекции	146
3.3.5.	Переходные и турбулентные режимы конвекции в сосуде	151
Глава 4. ГИДРОМЕХАНИКА И ТЕПЛОМАССООБМЕН ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ		156
4.1.	Конвекция, тепло- и массообмен при выращивании кристаллов вытягиванием из расплава (метод Чохральского)	157
4.1.1.	Математические модели и методы решения	159
4.1.2.	Изотермические течения расплава и механизмы распределения примеси	162
4.1.3.	Некоторые закономерности неизотермического течения и распределения примеси в расплаве	169
4.2.	Влияние тепловой конвекции на распределение примеси при выращивании кристаллов методом направленной кристаллизации	175
4.2.1.	Математическая модель процессов тепло- и массообмена при направленной кристаллизации	176
4.2.2.	Результаты параметрических исследований	180
4.3.	Конвекция, тепло- и массообмен в модели жидкостной эпитетаксии	184
4.3.1.	Математическая модель процесса жидкостной эпитетаксии	185
4.3.2.	Оценка численных значений критериев подобия для бинарных систем полупроводниковых материалов	189
4.3.3.	Режимы движения при горизонтальном расположении подложек	191
4.3.4.	Зависимость геометрии слоев от расположения подложек	195
4.3.5	Особенности жидкостной эпитетаксии в условиях невесомости	197
Глава 5. ЕСТЕСТВЕННО-КОНВЕКТИВНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ГЕОФИЗИЧЕСКОЙ ГИДРОДИНАМИКЕ		198
5.1.	Конвекция и слоистые структуры в стратифицированной жидкости	199
5.1.1.	Постановка задачи и параметры расчетов	201
5.1.2.	Развитие термоконцентрационной конвекции во времени и характерные пространственные структуры	203

5 1 3.	Влияние теплового и концентрационного чисел Рэлея на образование и эволюцию слоистых структур	208
5 1 4	Режимы конвекции и вертикальный масштаб слоистой структуры	211
5.2.	Конвекция и внутренние волны в приповерхностном слое жидкости	213
5.2.1.	Постановка задачи	213
5 2 2.	Перемешивание тяжелой и легкой жидкости после внезапного обрушения	215
5.2 3.	Конвекция при охлаждении однородной жидкости	219
5 2 4.	Конвекция и внутренние волны при охлаждении стратифицированной жидкости	226
Глава 6. СПЕЦИАЛЬНОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ		231
6.1.	Комплекс программ метода конечных разностей	232
6 1 1.	Комплекс программ общего назначения	232
6.1 2	Комплекс программ моделирования гидродинамики, тепло- и массообмена при выращивании кристаллов методом Чохральского	235
6.2.	Комплекс программ метода конечных элементов	237
6 2 1.	Основные принципы реализации комплекса FEMINA	237
6 2 2.	Описание основных модулей комплекса	238
6 2 3.	Работа с комплексом FEMINA на ЕС ЭВМ	240
6.3.	Программная поддержка матричного модуля	242
6.4.	Пакет программ статистической обработки численных реализаций	246
6.5.	Программы графической обработки	248
6 5 1.	Графическая система «Динамика»	248
6 5 2.	Диалоговая проблемно-ориентированная графическая система «Буер»	250
ЗАКЛЮЧЕНИЕ		253
Литература		256

- Вадим Иванович
Полежаев
- Андрей Викторович
Бунэ
- Наталья Анатольевна
Верезуб
- Геннадий Степанович
Глушки
- Владимир Леонидович
Грязнов
- Константин Георгиевич
Дубовик
- Сергей Александрович
Никитин
- Анатолий Иванович
Простомолотов
- Александр Иванович
Федосеев
- Сергей Гелиевич
Черкасов
- МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ
КОНВЕКТИВНОГО
ТЕПЛОМАССООБМЕНА
НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ—СТОКСА
- Утверждено к печати
Институтом проблем механики АН СССР
- Редактор Л. Е. Кононенко
Художник А. М. Драговой
Художественный редактор С. А. Литвак
Технический редактор Н. Н. Кокина
Корректоры В. Г. Петрова, М. П. Тарасова
- ИБ № 35316
- Сдано в набор 04.01.87. Подписано к печати
31.03.87. Т-05662. Формат 60×90^{1/16}. Бумага книж-
но-журнальная импортная. Гарнтура литератур-
ная. Печать высокая. Усл. печ. л. 17. Усл. кр. отт.
17,4. Уч.-изд. л. 18,4. Тираж 2300 экз. Тип. зак. 4007.
Цена 3 р. 30 к.
- Ордена Трудового Красного Знамени
издательство «Наука»
117864, ГСП-7, Москва, В-485, Профсоюзная ул., 90
2-я типография издательства «Наука»
121099, Москва, Г-99, Шубинский пер., 6



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКТИВНОГО ТЕПЛОМАССООБМЕНА НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА

Теоретическую основу механики вязкой жидкости составляют уравнения Навье — Стокса, выведенные более 150 лет назад. В общем виде решения этих уравнений мало изучены и содержат огромный объем информации. До середины 60-х годов XX в., т. е. до начала широкого распространения ЭВМ и численных методов в гидродинамике, постановка задачи об отыскании сложных и зависящих от большого числа параметров численных решений уравнений Навье — Стокса была непривычной и вызывала дискуссию. В настоящее время численное моделирование на основе уравнений Навье — Стокса сформировалось как самостоятельное направление в механике жидкости и газа и ее приложениях к аэрогидродинамике, машиностроению, энергетике, технологиям, а также при изучении природных явлений.