

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение  
Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук  
(УФИЦ РАН)

Институт механики им. Р.Р. Мавлютова – обособленное структурное  
подразделение Федерального государственного бюджетного научного  
учреждения Уфимского федерального исследовательского центра  
Российской академии наук  
(ИМех УФИЦ РАН)

*На правах рукописи*

**Привалов Лаврентий Юрьевич**

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОНВЕКТИВНЫХ ТЕЧЕНИЙ В  
КОНИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ ПРИ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ЗОНАХ  
ТЕПЛООБМЕНА**

01.06.01 – Математика и механика

Механика жидкости, газа и плазмы

**НАУЧНЫЙ ДОКЛАД**

Уфа – 2025

Работа выполнена в Институте механики им. Р.Р. Мавлютова – обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук

**Научный руководитель:**

**Михайленко Константин Иванович,**  
кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник лаборатории «Дифференциальных уравнений механики» Института механики им. Р.Р. Мавлютова – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук

**Рецензенты:**

**Демин Виталий Анатольевич,**  
доктор физико-математических наук, доцент кафедры «Теоретическая физика» Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Пермский государственный национальный исследовательский университет»

**Агишева Ульяна Олеговна,**  
кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник лаборатории «Механики многофазных систем» Института механики им. Р.Р. Мавлютова – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** Естественная конвекция, возникающая вследствие разности температур, является одним из наиболее доступных и технологичных механизмов переноса в сплошных средах. За последние годы было показано, что в компактных объёмах конвективные циркуляции способны не только обеспечивать перемешивание, но и реализовывать термоциклирование для полимеразной цепной реакции (ПЦР) без сложных термоциклеров. На этом фоне особый практический интерес представляет использование стандартных полипропиленовых микропробирок: они совместимы с лабораторной оснасткой, дешевы и обеспечивают воспроизводимые геометрические условия. Однако температурная картина течения внутри такой пробирки при нагреве снизу и охлаждении сверху существенно зависит от геометрии, тепловых контактов и ориентации в поле тяжести. Получение количественно достоверной модели этих режимов — необходимое условие для целенаправленной настройки конвективной ПЦР.

В диссертации рассматривается конвективное течение в стандартной полипропиленовой микропробирке при локальном нагреве дна и охлаждении верхней части стенки; исследуется влияние угла наклона пробирки на структуру течения и распределение температур, а также обосновывается применимость приближения Обербека–Буссинеска для рабочих перепадов температур. На базе численного эксперимента получены статистики времени пребывания частиц (модели молекул ДНК) в технологически значимых температурных диапазонах, что напрямую связано с эффективностью ПЦР.

**Цель работы.** Разработать и верифицировать вычислительную постановку для описания естественной конвекции в стандартной микропробирке с зонами нагрева и охлаждения, установить влияние угла наклона на режим течения и температурные распределения и получить статистические характеристики времени пребывания частиц-трассеров в ключевых температурных зонах ПЦР.

### Задачи исследования.

1. Сформировать воспроизводимую 3D-постановку задачи для микропробирки: область, граничные условия нагрева и охлаждения, сетку конечных объёмов и параметры расчёта.
2. Обосновать применимость приближения Буссинеска для рассматриваемого диапазона перепадов температур; сравнительно оценить решения с полной термогидродинамической системой.
3. Провести серию расчётов для диапазона углов наклона, классифицировать режимы течения и выделить области смены режима.
4. Выполнить трассировку частиц и построить гистограммы времени пребывания в заданных температурных интервалах; построить интегральные карты (тепловые карты) по углам наклона.

5. Сформулировать рекомендации по управлению режимами конвективной ПЦР в стандартной микропробирке простым изменением угла наклона и граничных температур.

### **Научная новизна.**

- Предложена и верифицирована вычислительная постановка для стандартной микропробирки, демонстрирующая эквивалентность решений в приближении Буссинеска и по полной системе (в установившемся режиме) при заданных диапазонах  $\Delta T$  и размерах области.
- Выявлен и количественно описан диапазон углов наклона микропробирки относительно поля тяжести, при котором происходит перестройка структуры течения (смена режима), сопровождающаяся существенным сдвигом распределений температур по траекториям частиц.
- Получены интегральные карты (по углу наклона) распределения времени пребывания в температурных зонах ПЦР, что обеспечивает прямую связь гидродинамической картины с технологическими метриками реакции.

**Практическая значимость.** Результаты дают инженерную основу для настройки конвективной ПЦР в стандартных микропробирках без изменения аппаратного состава: регулировкой угла наклона и граничных температур можно целенаправленно смещать преобладающие температуры и доли времени пребывания в зонах денатурации, отжига и элонгации. Это упрощает процесс, повышает воспроизводимость и расширяет возможности портативных систем.

### **Положения, выносимые на защиту.**

1. В рассматриваемом классе параметров задача корректно описывается моделью Обербека–Буссинеска; решения согласуются с полной системой по интегральным метрикам и энергодолям ведущих POD-мод.
2. Угол наклона пробирки является эффективным параметром управления: он задаёт смену режима течения и воспроизводимо смещает распределение температур по траекториям частиц.
3. Метод статистической трассировки частиц даёт физически интерпретируемые метрики времени пребывания частицы в определённых температурных интервалах, пригодные для прямой оптимизации режимов конвективной ПЦР.

**Достоверность полученных результатов** обеспечивается: использованием консервативных численных схем второго порядка метода конечного объёма на сетках, прошедших контроль качества и тесты сеточной независимости; сопоставлением постановок (Буссинеск/полная система) на идентичных сетках и граничных условиях; применением POD-анализа; статистической устойчивостью результатов трассировки при большом числе частиц и длительности интегрирования.

### **Апробация работы**

Основные результаты научно-квалификационной работы докладывались и обсуждались на Уфимской осенней математической школе (Уфа, 2022); XIII Всероссийском съезде по теоретической и прикладной механике (Санкт-Петербург, 2023); конференции «Математика: Материалы 61-й Международной научной студенческой конференции» (Новосибирск, 2023); конференции «Мавлютовские чтения: Материалы XVII Всероссийской молодежной научной конференции» (Уфа, 2024).

### **Публикации**

Основные результаты по теме диссертации изложены в 10 печатных изданиях, 1 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 1 – в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 4 – в тезисах докладов.

### **Личный вклад**

Построение сетки конечных объёмов, постановка задач, первичная оценка результатов и написание статей выполнены совместно с научным руководителем. Валидация сетки конечных объёмов, подбор параметров, проведение расчётов, полный анализ результатов, вывод и применение методов для оценки качества ПЦР и подведение итогов проведены автором самостоятельно.

### **Объём и структура работы**

Выпускная квалификационная работа состоит из введения, 4 глав. Полный объём диссертации составляет 86 страниц, включая 17 рисунков и 3 таблицы.

### **Благодарности**

Автор выражает глубокую признательность и благодарность своему научному руководителю к.ф.-м.н. Михайленко Константину Ивановичу за постановку задач, полезные советы, техническую помощь и поддержку при подготовке квалификационной работы.

## Заключение

В работе выполнено комплексное численное исследование естественной конвекции в стандартной полипропиленовой микропробирке объёмом порядка 0.2 мл в постановке, релевантной конвекционной ПЦР. Разработана и реализована в пакете OpenFOAM воспроизводимая методика расчёта: построение геометрии нижней части пробирки, формирование преимущественно регулярной (с минимальными искажениями) трёхмерной сетки конечных объёмов, задание граничных условий нагрева и охлаждения, а также серия вычислительных экспериментов при изменении угла наклона ёмкости в широком диапазоне. Методически обоснован выбор преимущественно регулярной сетки: такая дискретизация улучшает сходимость и устойчивость решения по сравнению с неструктурными тетраэдральными разбиениями при сопоставимом числе элементов, что критично для корректного выявления режимов течения и тонких изменений при малых наклонах. Введённый показатель времени установления (по снижению числа итераций температурного решения до единицы) оказался удобным интегральным критерием завершённости переходных процессов и смены режимов. Для систематической интерпретации введены показатели установления режима течения, средних и максимальных модулей скорости, статистики траекторий и времён пребывания в температурных зонах, значимых для ПЦР.

Показано, что в рассматриваемых диапазонах параметров течение остаётся ламинарным, а характер конвекции чувствителен к ориентации пробирки относительно поля тяжести. Установлен качественный сдвиг структуры потока при малых положительных наклонах: в окрестности угла порядка  $14^\circ$  формируется двухвихревой режим, сопровождающийся заметным снижением средней скорости циркуляции по сравнению с одновихревой циркуляцией. В то же время для больших по модулю наклонов — как в положительную, так и в отрицательную сторону — достигаются максимальные средние скорости, благоприятные для интенсивного переноса. Эти закономерности согласуются с распределениями скоростей по объёму: преобладающие значения сосредоточены в нижней трети интервального диапазона, а изменение наклона смещает и «сужает/расширяет» спектр характерных скоростей.

Выполнена валидация применимости приближения Обербека–Буссинеска для описания течения в микропробирке. Сопоставление результатов с расчётами по полной термогидродинамической системе с температурно-зависящими свойствами (плотность, вязкость, теплоёмкость, теплопроводность) продемонстрировало качественное совпадение основных полей и мод потока. Ортогональное (POD) разложение показало эквивалентность ведущих мод и их энергетических долей, что оправдывает использование упрощённой модели для последующих параметрических исследований и статистики траекторий при существенно меньших вычислительных затратах.

Для оценки качества конвекции при ПЦР в микропробирке реализована лагранжева трассировка маркеров (как модель условных молекул ДНК) в установившихся полях скоростей с накоплением времени пребывания в

диапазонах температур, соответствующих стадиям денатурации, отжига и элонгации. Полученные гистограммы и тепловые карты подтвердили: наклон пробирки является простым и эффективным регулятором термической истории реагента. Наклоны в «правую» сторону (ориентируясь по направлению движения охлаждающего элемента при вращении) смещают преобладающие температуры вниз, «левые» — вверх; малые положительные наклоны, при которых возникает двухвихревой режим, приводят к перераспределению времён пребывания и, следовательно, к потенциальному ухудшению условий для цепной реакции. Тем самым показана универсальная инженерная опция: регулировка угла наклона позволяет целенаправленно настраивать баланс времён в зонах денатурации (95°C), отжига (50~65°C) и элонгации (68~72°C) без изменения аппаратной части. Этот вывод носит общий характер и применим ко всем стандартным микропробиркам сопоставимой геометрии.

### **Основные публикации по теме научно–квалификационной работы**

1. Привалов Л.Ю., Михайленко К.И. Характер течения в стандартной полипропиленовой микропробирке при конвекционной ПЦР // Вестник Пермского университета. Физика. — 2025. — №2. — С. 58—65.

2. Привалов Л.Ю., Михайленко К.И. Исследование соответствия системы уравнений тепловой конвекции в приближении Буссинеска модели течения в микропробирке при проведении ПЦР — 2025. (в печати)

3. Привалов, Л. Влияние угла наклона микропробирки на температурный режим конвективной ПЦР: численное моделирование и статистический анализ. — 2025. (в печати)

4. Garafutdinov R.R. et al. Convective polymerase chain reaction in standard microtubes // *Analytical Biochemistry*. — 2022. — Vol. 641. — P. 114565.

5. Привалов Л.Ю. Моделирование динамики потокораспределения в разветвленных системах // Молодежный вестник УГАТУ. — 2023. — 1(27). — С. 116—121.

6. Привалов Л.Ю., Маякова С.А. Оценка сходимости и устойчивости алгоритма гидравлического расчета разветвленных течений, основанного на применении графов // Уфимская осенняя математическая школа: Материалы Международной научной конференции, Уфа, 28 сентября – 1 октября 2022 года. — Уфа : Уфимский университет науки и технологий, 2022. — С. 406—408.

7. Привалов Л. Ю. Гидравлическая задача потокораспределения на графах // Многофазные системы. — 2023. — Т. 18, №2. — С. 80—81.

8. Привалов Л.Ю., Михайленко К.И. Нестационарная гидравлическая модель потокораспределения на основе графов // XIII Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике: Сборник тезисов докладов. В 4-х томах, Санкт-Петербург, 21–25 августа 2023 года. — Санкт-Петербург : Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2023. — С. 216–218.

9. Привалов Л.Ю. Условие вырождения оператора распространения взаимодействия в системе потокораспределения на графах // Математика:

Материалы 61-й Международной научной студенческой конференции, Новосибирск, 17–26 апреля 2023 года. — Новосибирск: Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, 2023. — С. 78–79.

10. Привалов Л.Ю. Варианты численного решения гидродинамической системы графа перетоков // Мавлютовские чтения: Материалы XVII Всероссийской молодежной научной конференции. В 9-ти томах, Уфа, 21–23 ноября 2023 года. — Уфа: Уфимский университет науки и технологий, 2024. — С. 794—798.