

УДК 533.15:536.25

**Особенности возникновения структурированных формирований на границе смены режимов «диффузия–концентрационная конвекция» при изотермическом смешении бинарной смеси, в равной степени разбавленной третьим компонентом\***

**В.Н. Косов<sup>1,2</sup>, О.В. Федоренко<sup>2</sup>, Д.Б. Жакебаев<sup>3</sup>, А.П. Кизбаев<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Казахский национальный педагогический университет им. Абая, Алматы

<sup>2</sup>Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики КазНУ им. аль-Фараби, Алматы

<sup>3</sup>Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы

E-mail: kosov\_vlad\_nik@list.ru

Численным образом изучены особенности смены режимов «диффузия–гравитационная концентрационная конвекция». Показано, что при определенном составе смеси и давлении за счет различия в коэффициентах диффузии компонентов возникают существенно нелинейные распределения концентраций компонентов, которые приводят к соответствующему распределению плотности газовой смеси. Это является причиной образования структурированных формирований и возникновения конвективной неустойчивости в исследуемых смесях. Проведена оценка времени возникновения конвективных течений и средней скорости переноса компонентов. Полученные результаты сравниваются с опытными данными.

**Ключевые слова:** диффузия, конвекция, давление, концентрация, неустойчивость.

**Введение**

Исследование режимов многокомпонентного переноса, связанных с корректным определением скоростей, концентрационных и температурных полей смешивающихся газообразных и конденсированных смесей, является одной из актуальных проблем в современной теплофизике [1], широко изучаемых при сжигании различных типов топлив, горении природных газов, испарении и конденсации многофазных систем [2–4]. Очевидно, что существование режимов смешения носит пороговый характер, т.е. определяется критическими числами Рэлея и критическими значениями давления. В связи с этим

---

\* Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Комитета науки Минобрнауки Республики Казахстан по проекту № AP05130986 «Особые режимы и возникновение пространственно-временных конвективных формирований при диффузии в многокомпонентных газовых смесях».

определение границы смены режимов смешения и прогнозирование их состояния представляются важными для задач конвективного теплопереноса как в фундаментальном, так и прикладном плане.

В опытах по изучению многокомпонентного смешения в газовых системах при повышенных давлениях [5], диффузии смеси паров растворов в инертный газ [6] были зарегистрированы конвективные течения, приводящие к значительному росту парциальных потоков компонентов. Было показано, что обнаруженный синергетический эффект [5, 6] связан со значительным увеличением скорости смешения и преимущественным переносом самого тяжелого по плотности компонента смеси. Следуя физическому смыслу, возникновение и развитие концентрационной конвекции должно происходить в рамках традиционных представлений тепловых задач Рэлея [7, 8]. Однако для ситуаций, изученных в работах [5, 6], когда движения возникают при устойчивой стратификации в изотермической смеси, необходимо учитывать влияние нескольких концентрационных градиентов. Исследования [9, 10] показали, что в трехкомпонентных системах с существенным отличием молекулярных весов  $M_i$  компонентов и коэффициентов взаимной диффузии  $D_{ij}$  [11] существуют области затухающих и нарастающих возмущений. В зависимости от направления градиента плотности смеси могут иметь место различные механизмы смешения компонентов: как диффузионные, так и вызванные конвективной неустойчивостью. В работе [12] было показано, что при диффузии бинарной системы, в равной степени разбавленной третьим компонентом, могут иметь место нелинейные парциальные концентрационные зависимости от координаты, приводящие к формированию немонотонного распределения плотности смеси, которое может также служить причиной гравитационной конвективной неустойчивости. Вместе с тем необходимо отметить, что возможности подхода [7, 8], распространенные на случай смешения изотермических тройных газовых смесей, ограничены и не позволяют описать динамику конвективных течений и время наступления неустойчивого режима. В работах по изучению нестационарного испарения растворов с учетом конвекции в газовой фазе [13, 14] были предложены численные подходы для моделирования сложного массопереноса, которые показали хорошее согласование между результатами вычислительного эксперимента и опытными данными по оценке скорости испарения бинарного раствора в инертный газ. Следует полагать, что для случая диффузии в тройных смесях численное моделирование процессов смешения вблизи границы смены кинетических режимов позволит более детально выявить характерные особенности многокомпонентного массопереноса.

В настоящей работе предлагается расчетная модель для изучения изотермического переноса бинарной газовой смеси, в равной степени разбавленной третьим компонентом, посредством двухмерного моделирования в вертикальном цилиндрическом канале конечных размеров. Полученные результаты численного исследования сопоставляются с опытными данными.

### Базовые уравнения конвективных возмущений при диффузии.

#### Численный алгоритм

Смену режимов «диффузия–концентрационная конвекция» в трехкомпонентных газовых смесях можно описать системой уравнений гидродинамики для возмущенных величин в приближении Обербека–Буссинеска [7]. Эта система состоит из уравнения Навье–Стокса, закона сохранения числа частиц смеси и компонентов, и с учетом усло-

вия независимой диффузии  $\sum_{i=1}^3 \mathbf{j}_i = 0$  и  $\sum_{i=1}^3 c_i = 1$  имеет вид [9, 10]

$$\rho \left[ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla \mathbf{u}) \right] = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \left( \frac{\eta}{3} + \xi \right) \nabla \operatorname{div} \mathbf{u} + \rho \mathbf{g},$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \operatorname{div}(n\mathbf{v}) = 0, \quad \frac{\partial c_i}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla c_i = -\operatorname{div}\mathbf{j}_i, \quad (1)$$

$$\mathbf{j}_1 = -(D_{11}^*\nabla c_1 + D_{12}^*\nabla c_2), \quad \mathbf{j}_2 = -(D_{21}^*\nabla c_1 + D_{22}^*\nabla c_2),$$

$$\rho = \rho(c_1, c_2, p), \quad T = \text{const},$$

здесь  $\mathbf{u} = (\rho_1\mathbf{u}_1 + \rho_2\mathbf{u}_2 + \rho_3\mathbf{u}_3)/\rho$  — среднемассовая скорость,  $\mathbf{v} = (n_1\mathbf{u}_1 + n_2\mathbf{u}_2 + n_3\mathbf{u}_3)/n$  — среднечисловая скорость,  $c_i$  — концентрация  $i$ -го компонента,  $D_{ij}$  — практические коэффициенты диффузии,  $p$  — давление,  $\rho$  — плотность смеси,  $\mathbf{g}$  — ускорение силы тяжести,  $\eta$  и  $\xi$  — коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости,  $\mathbf{j}_i$  — плотность диффузионного потока  $i$ -го компонента. Связь практических коэффициентов диффузии  $D_{ij}^*$  с коэффициентами взаимной диффузии  $D_{ij}$  [11] определяется соотношениями

$$D_{11}^* = \frac{D_{13}[c_1D_{32} + (c_2 + c_3)D_{12}]}{D}, \quad D_{12}^* = -\frac{c_1D_{23}[D_{12} - D_{13}]}{D},$$

$$D_{22}^* = \frac{D_{23}[c_2D_{13} + (c_1 + c_2)D_{12}]}{D}, \quad D_{21}^* = -\frac{c_2D_{13}[D_{12} - D_{23}]}{D},$$

$$D = c_1D_{23} + c_2D_{13} + c_3D_{12}.$$

При решении системы (1) с применением метода малых возмущений получим систему уравнений концентрационной конвекции для возмущенных величин, которая имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u}\nabla)\mathbf{u} = -\frac{1}{\rho_0}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{u} + g(\beta_1c_1 + \beta_2c_2)\boldsymbol{\gamma},$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla\langle c_1 \rangle = D_{11}^*\nabla^2c_1 + D_{12}^*\nabla^2c_2, \quad (2)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla\langle c_2 \rangle = D_{21}^*\nabla^2c_1 + D_{22}^*\nabla^2c_2,$$

$$\operatorname{div}\mathbf{v} = 0,$$

где  $\langle c_i \rangle$  — постоянное среднее значение концентрации, принимаемое в качестве начала отсчета,  $\beta_i$  — коэффициент, характеризующий зависимость плотности газовой смеси от концентрации  $i$ -го компонента,  $\boldsymbol{\gamma}$  — единичный вектор,  $\nu$  — коэффициент кинематической вязкости,  $\rho_0$  — среднее значение плотности смеси.

Возмущения плотности и концентрации, а также обусловленные ими отклонения плотности от среднего значения  $\rho_0$  малы по сравнению с их средними значениями, поэтому плотность зависит от возмущений состава линейно [7, 9]:

$$\rho = \rho_0(1 - \beta_1c_1' - \beta_2c_2'),$$

где  $c_i'$  — возмущение концентрации  $i$ -го компонента,  $\beta_i = \frac{1}{\rho_0} \left( \frac{\partial \rho}{\partial c_i} \right)_{p, T, c_j}$ . В выражении

для плотности также учтено, что изменения плотности, вызванные неоднородностью давления, малы по сравнению с изменениями, обусловленными неоднородностью состава.

Различия в возмущениях среднемассовой и среднечисловой скорости имеют один порядок, следовательно, они не будут существенны для системы уравнений (2). Именно поэтому при  $H \gg r$  (где  $H$  — длина диффузионного канала,  $r$  — радиус диффузионного канала) осуществим замену  $\nu$  на  $u$  [10].

Выберем следующие масштабы единиц измерения: характерный линейный размер полости  $H$ , времени —  $H^2/\nu$ , скорости —  $D_{22}^*/H$ , концентрации  $i$ -го компонента —  $A_i H$ , давления —  $\rho_0 \nu D_{22}^*/H^2$ . Система уравнений (2) в безразмерных величинах будет иметь вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1}{\partial t} + \frac{1}{Pr_{22}} \mathbf{u} \nabla c_1 &= \frac{1}{Pr_{11}} \Delta c_1 + \frac{1}{Pr_{22}} \tau_{12} \Delta c_2, \\ \frac{\partial c_2}{\partial t} + \frac{1}{Pr_{22}} \mathbf{v} \nabla c_2 &= \frac{A_1}{A_2} \cdot \frac{1}{Pr_{22}} \tau_{21} \Delta c_1 + \frac{1}{Pr_{22}} \Delta c_2, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{1}{Pr_{22}} \nabla(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) &= -\nabla p + \Delta \mathbf{u} + (Ra_1 \tau_{11} c_1 + Ra_2 c_2) \boldsymbol{\gamma}, \\ \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $Pr_{ii} = \nu/D_{ii}^*$  — диффузионное число Прандтля,  $Ra_i = g \beta_i A_i H^4 / D_{ii}^* \nu$  — парциальное число Рэлея, где  $A_i$  — безразмерный начальный градиент концентрации  $i$ -го компонента,  $\tau_{ij} = D_{ij}^*/D_{22}^*$  — параметры, определяющие соотношение между практическими коэффициентами диффузии.

Алгоритм численного решения системы диффузионных уравнений был апробирован в работах [15, 16] для случая смешения бинарной смеси с наименьшим и наибольшим молекулярными весами компонентов с третьим газом, имеющим промежуточное значение молекулярного веса. Следует полагать, что для рассматриваемого случая смешения бинарной смеси, в равной степени разбавленной третьим компонентом, основные допущения, возникающие при численном моделировании переноса, будут аналогичны описанным в публикациях [15, 16].

Как и в опытных исследованиях [9, 10], смешение осуществляется в канале цилиндрической формы. Газ с наименьшим молекулярным весом  $M_1$  располагается в верхней части канала и затем диффундирует в более тяжелый компонент с молекулярным весом  $M_3$ , который находится в нижней части. Оба газа в равной степени разбавляются третьим компонентом с наибольшим молекулярным весом  $M_2$ . Рассматривается двумерная область сечения цилиндрической области  $H \times d$  в декартовой системе координат, где  $H$  — высота цилиндрического канала, а  $d = 2r$  — его диаметр (рис. 1а). Для регистрации изоконцентрационных линий, характеризующих возникновение и развитие конвекции, расчеты проводились в безразмерной сетке с размерами  $128 \times 128$  ячеек.

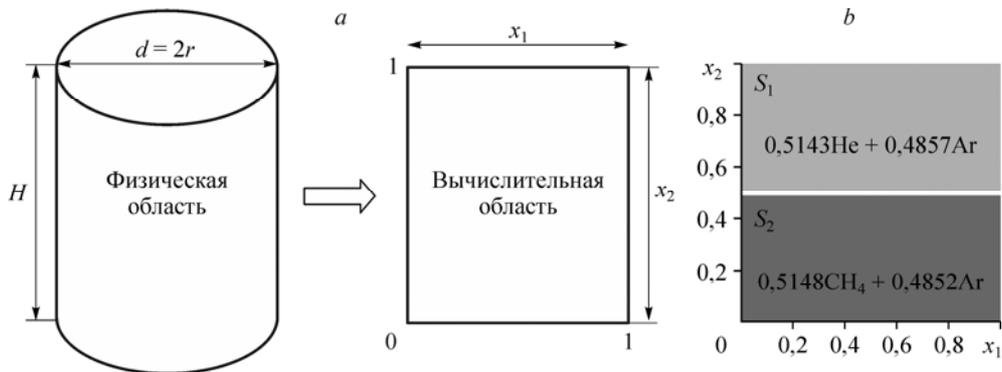


Рис. 1. Моделирование массопереноса на границе смены режимов.

$a$  — физические и вычислительные области смешения,  $b$  — начальные условия размещения трехкомпонентных смесей в диффузионном канале.

Для численного решения системы уравнений (3) используется схема расщепления по физическим параметрам [17, 18]. На первом этапе перенос количества движения осуществляется только за счет конвекции и диффузии. Промежуточное поле скоростей находится на основе метода трехточечной прогонки с применением явной схемы Адамса–Бэшфорта и неявной схемы Кранка–Николсона для конвективных и диффузионных членов соответственно со вторым порядком точности по пространству [19, 20]. Дискретизация по пространству осуществляется вторым порядком точности и имеет вид

$$\frac{\hat{\mathbf{u}}^n - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\frac{1}{2}(3H^n - H^{n-1}) + \frac{1}{2}\Delta(\hat{\mathbf{u}}^n + \mathbf{u}^n) + (\text{Ra}_1\tau_{11}c_1 + \text{Ra}_2c_2)\boldsymbol{\gamma}, \quad (4)$$

где  $H^n = -\nabla(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})^n$  — конвективные члены,  $\hat{\mathbf{u}}$  — промежуточное поле скоростей,  $\Delta t$  — шаг по времени,  $n$  — номер итерации в момент  $t^n$ . Обозначим левую часть уравнения (4) через  $\mathbf{q}$ :  $\mathbf{q} = \hat{\mathbf{u}}^n - \mathbf{u}^n$ . Произведя замену всех  $\hat{\mathbf{u}}^n$  в уравнении (4), получим

$$\mathbf{q} = -\frac{\Delta t}{2}(3H^n - H^{n-1}) + \frac{\Delta t}{2}\Delta(\mathbf{q} + 2\mathbf{u}^n) + \Delta t(\text{Ra}_1\tau_{11}c_1 + \text{Ra}_2c_2)\boldsymbol{\gamma}.$$

Уравнение (4) можно привести к виду

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{2}\Delta\right)\mathbf{q} = -\frac{\Delta t}{2}(3H^n - H^{n-1}) + \Delta t\Delta\mathbf{u}^n + \Delta t(\text{Ra}_1\tau_{11}c_1 + \text{Ra}_2c_2)\boldsymbol{\gamma}. \quad (5)$$

В двумерном случае уравнение (5) приводится к виду

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)\mathbf{q} = \mathbf{d}, \quad (6)$$

где  $\mathbf{d} = -\frac{\Delta t}{2}(3H^n - H^{n-1}) + \Delta t\Delta\mathbf{u}^n + \Delta t(\text{Ra}_1\tau_{11}c_1 + \text{Ra}_2c_2)\boldsymbol{\gamma}$ .

Предположим, что уравнение (6) аппроксимируется следующим образом [19]:

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}\right)\left(1 - \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)\mathbf{q} = \mathbf{d}. \quad (7)$$

Если считать, что производные четвертого порядка пренебрежимо малы, то уравнение (7) можно считать справедливым приближением уравнения (6):

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\Delta t^2}{4} \cdot \frac{\partial^4}{\partial x_1^2 \partial x_2^2}\right)\mathbf{q} = \mathbf{d}.$$

Для нахождения  $\mathbf{q}$  уравнение (7) решается в два шага:

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}\right)\mathbf{q}' = \mathbf{d}, \quad (8)$$

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)\mathbf{q} = \mathbf{q}'.$$

Уравнения (8) решаются методом трехточечной прогонки, в результате применения которого находится  $\mathbf{q}$ . Затем находится  $\hat{\mathbf{u}}^n$ :

$$\hat{\mathbf{u}}^n = \mathbf{u}^n + \mathbf{q}.$$

На втором этапе по найденному промежуточному полю скоростей находится поле давления с применением метода Фурье:

$$\Delta p = \frac{\nabla \cdot \hat{\mathbf{u}}^n}{\Delta t}. \quad (9)$$

На третьем этапе предполагается, что перенос осуществляется только за счет градиента давления, и пересчитывается окончательное поле скоростей:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \hat{\mathbf{u}}^n}{\Delta t} = -\nabla p. \quad (10)$$

На четвертом этапе вычисляется концентрация компонентов смеси на основе метода трехточечной прогонки с использованием схемы Кранка–Николсона с учетом найденных полей скоростей  $\mathbf{u}^{n+1}$ :

$$\frac{c_1^{n+1} - c_1^n}{\Delta t} = \frac{1}{2}(F^{n+1} - F^n) + \frac{1}{Pr_{11}} \Delta c_1^n + \frac{1}{Pr_{12}} \Delta c_2^n,$$

$$\frac{c_2^{n+1} - c_2^n}{\Delta t} = \frac{1}{2}(F^{n+1} - F^n) + \frac{1}{Pr_{21}} \Delta c_1^n + \frac{1}{Pr_{22}} \Delta c_2^n,$$

$$c_3^{n+1} = 1 - c_1^{n+1} - c_2^{n+1},$$

где  $F^n = -\nabla(\mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{c}^n)$  — конвективные члены.

Начальные условия смешения изотермических тройных смесей представлены в таблице. Здесь под  $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$  понимается внешняя нормаль к границе расчетной области,  $x_B$  — границы расчетной области.

Начальные и граничные условия

Таблица

| Начальные условия  | Граничные условия   |
|--|---|
| $\mathbf{u}(x, \tau = 0) = 0,$   | $\mathbf{u}(x_B, \tau) = 0,$  |
| $c_1(x, \tau = 0) _{x \in S_1} = 0,5143, \quad c_1(x, \tau = 0) _{x \in S_2} = 0$      | $\frac{\partial c_i}{\partial \mathbf{n}} _{(x, \tau)} = 0, \quad i = 1-3.$ |
| $c_2(x, \tau = 0) _{x \in S_1} = 0,4857, \quad c_2(x, \tau = 0) _{x \in S_2} = 0,4852$ |   |
| $c_3(x, \tau = 0) _{x \in S_1} = 0, \quad c_3(x, \tau = 0) _{x \in S_2} = 0,5148$      |   |

### Обсуждение результатов

На рисунках 2–4 представлены численные результаты, характеризующие диффузионное и конвективное смешение для системы 0,5143 He (1) + 0,4857 Ar (2) – 0,5148 CH<sub>4</sub> (3) + 0,4852 Ar (2), экспериментально исследованной в работе [21] при разных давлениях в различные моменты времени. Здесь и далее числа перед химическим элементом определяют концентрацию компонента (мольные доли) в смеси, а цифры в скобках после компонента определяют его нумерацию в системе.

При  $T = 298$  К и нормальном давлении коэффициенты взаимной диффузии компонентов составляют:  $D_{12} = 0,76 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $D_{13} = 0,69 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $D_{23} = 0,21 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ . Как показали расчеты и обзоры опытных данных, приведенных в работе [11] при комнатной температуре  $D_{ij}$  для указанных газов до давления порядка 4,0 МПа, выполняется условие  $D_{ij} \cdot p = \text{const}$ . Поэтому условие, когда коэффициенты взаимной диффузии гелия в аргон и метан приблизительно равны и более чем в три раза превышают коэффициент диффузии

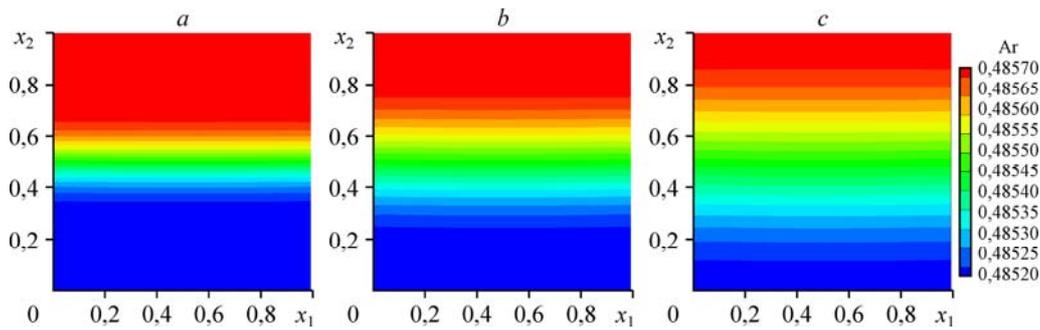


Рис. 2. Изоконцентрационные линии аргона для трехкомпонентной системы  
 $0,5143 \text{ He (1)} + 0,4857 \text{ Ar (2)} - 0,5148 \text{ CH}_4 \text{ (3)} + 0,4852 \text{ Ar (2)}$   
 при  $\nabla \rho < 0$ ,  $p = 0,2 \text{ МПа}$ ,  $T = 298 \text{ К}$ ,  $\text{Ra}_1 = 7,28$ ,  $\text{Ra}_2 = 20,96$ .  
 $t = 4,36 \text{ (a)}$ ,  $17,43 \text{ (b)}$ ,  $26,15 \text{ (c)}$  с.

аргона в метан ( $D_{12} \approx D_{13} \gg D_{23}$ ), выполняется в широком интервале давлений. Также для этих интервалов выполняются и следующие соотношения парциальных плотностей компонентов:  $\rho_2/\rho_1 = 10$ ,  $\rho_3/\rho_1 = 4$ ,  $\rho_2/\rho_3 = 2,5$ .

Опыты показали, что в системе  $0,5143 \text{ He (1)} + 0,4857 \text{ Ar (2)} - 0,5148 \text{ CH}_4 \text{ (3)} + 0,4852 \text{ Ar (2)}$  до давления  $p \approx 1,0 \text{ МПа}$  наблюдается диффузия. Экспериментальные концентрации гелия, аргона и метана совпадают с вычисленными по уравнениям Стефана-Максвелла [11] значениями, полученными в предположении диффузии. При этом концентрация балластного газа увеличивается в верхней колбе диффузионного аппарата, т.е. происходит «противодиффузия», когда наблюдается перенос компонента из области с меньшей концентрацией в область с большей. Затем с увеличением давления регистрировался значительный немонотонный рост с максимумом интенсивности переноса для основных диффундирующих компонентов гелия и метана, а концентрация балластного газа возрастала в нижней колбе. Такое поведение основных диффундирующих компонентов и балластного газа свидетельствует о том, что в системе возникли конвективные течения, приводящие к росту парциальных потоков компонентов.

На рис. 2a–2c изоконцентрационные линии балластного газа (аргона) монотонно изменяются с течением времени. Этому типу смешения соответствует диффузионный процесс, который был отмечен по результатам опытов [9, 21]. Дальнейшее увеличение давления приводит к искривлению концентрационных линий аргона, которые с течением

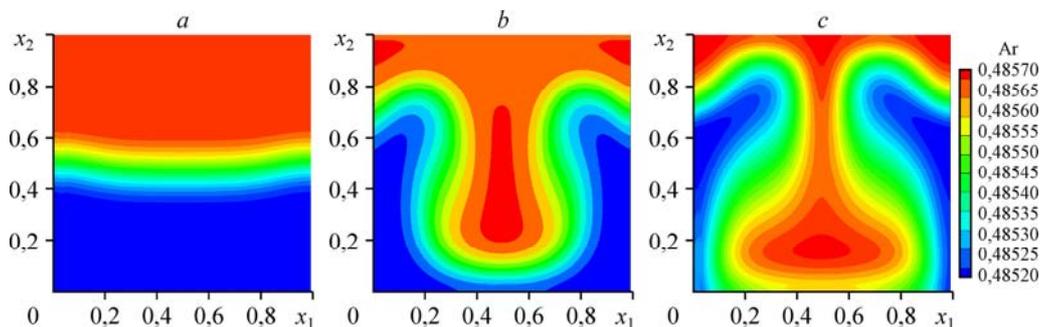


Рис. 3. Изоконцентрационные линии аргона для трехкомпонентной системы  
 $0,5143 \text{ He (1)} + 0,4857 \text{ Ar (2)} - 0,5148 \text{ CH}_4 \text{ (3)} + 0,4852 \text{ Ar (2)}$   
 при  $\nabla \rho < 0$ ,  $p = 1,0 \text{ МПа}$ ,  $T = 298 \text{ К}$ ,  $\text{Ra}_1 = 18,20$ ,  $\text{Ra}_2 = 52,39$ .  
 $t = 4,36 \text{ (a)}$ ,  $17,43 \text{ (b)}$ ,  $26,15 \text{ (c)}$  с.

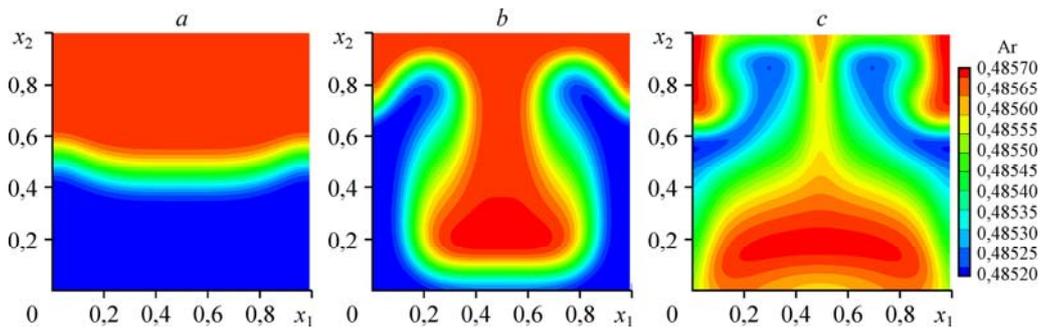


Рис. 4. Изоконцентрационные линии аргона для трехкомпонентной системы  $0,5143 \text{ He (1)} + 0,4857 \text{ Ar (2)} - 0,5148 \text{ CH}_4 \text{ (3)} + 0,4852 \text{ Ar (2)}$  при  $\nabla\rho < 0$ ,  $p = 1,5 \text{ МПа}$ ,  $T = 298 \text{ К}$ ,  $Ra_1 = 54,59$ ,  $Ra_2 = 157,18$ .  
 $t = 4,36 \text{ (a)}$ ,  $17,43 \text{ (b)}$ ,  $26,15 \text{ (c)}$ .

времени становятся существенно нелинейными (рис. 3а–3с). Искривление изоконцентрационных линий и рост концентрации аргона наблюдается по направлению к нижней части расчетной области, что соответствует экспериментальным данным [21]. Это свидетельствует о том, что в системе реализуются условия, связанные с возникновением неустойчивости механического равновесия, определяющие переход от диффузионного режима к конвективному. Время, в течение которого происходит смена режимов, оценивается в несколько секунд, что согласуется с результатами, приведенными в работе [22]. Наконец, при давлениях  $p > p_{**}$  ( $p_{**}$  — критическое давление) в системе реализуются условия возникновения структурированных формирований (рис. 4а–4с), динамика развития которых приводит к пульсационным режимам.

Анализ результатов численного исследования, приведенных на рис. 3, 4 показывает, что искривление изоконцентрационных линий существенным образом возрастает с увеличением давления и приводит к возникновению сложного структурированного течения, которое интенсифицирует суммарный массоперенос, отмеченный в исследовании [21]. Также в работе [21] приводятся подтверждения существования сложных конвективных течений в тройных газовых смесях посредством применения визуального метода исследования. Поэтому следует полагать, что результаты расчета изоконцентрационных профилей, изображенных на рис. 2–4, несмотря на приведенные допущения, адекватно описывают тройную диффузию и разнообразие режимов.

Наличие сложной динамики суммарного массопереноса подтверждается и результатами, приведенными на рис. 5. В случае диффузии система устойчива и профиль скорости практически монотонен. При дальнейшем увеличении давления он становится существенно нелинейным, что свидетельствует о наличии восходящих и нисходящих течений, вызванных конвективной неустойчивостью.

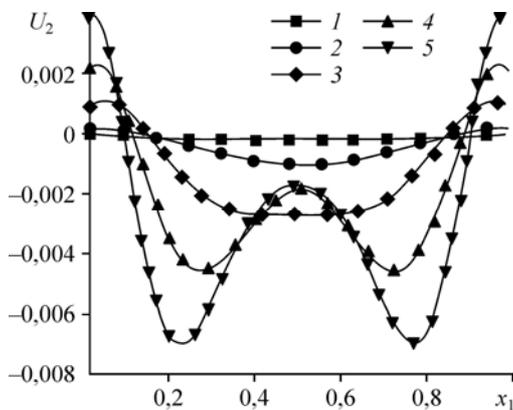


Рис. 5. Профиль скорости  $U_2$  в сечении  $x_2 = 0,5$  для системы  $0,5143 \text{ He (1)} + 0,4857 \text{ Ar (2)} - 0,5148 \text{ CH}_4 \text{ (3)} + 0,4852 \text{ Ar (2)}$  при  $T = 298 \text{ К}$ ,  $t = 49,8 \text{ с}$  и различных давлениях.  $p = 0,2 \text{ (1)}$ ,  $0,5 \text{ (2)}$ ,  $1 \text{ (3)}$ ,  $1,5 \text{ (4)}$ ,  $2 \text{ (5)} \text{ МПа}$ .

### Заключение

Таким образом, предлагаемая модель по изучению изотермического переноса в трехкомпонентных газовых смесях позволяет определять давления, при которых происходит смена режимов «диффузия–концентрационная гравитационная конвекция». Основным признаком перехода из диффузионного режима в конвективный является возникновение нелинейных изоконцентрационных линий за счет существенного различия коэффициентов взаимной диффузии компонентов. С увеличением давления искривленность изоконцентрационных линий возрастает, что является причиной возникновения конвективной неустойчивости. Для рассматриваемой смеси оценено время потери устойчивости, которое составляет несколько секунд. При неустойчивом смешении возможен пульсационный режим переноса, который связан с возникновением структурных конвективных формирований.

### Список литературы

1. Третьяков В.В., Свириденко А.А. Газодинамика и смесеобразование в закрученных течениях с прецессией воздушного потока // *Материалы междунар. конф. «Современные проблемы теплофизики и энергетики»*, Москва 9–11 октября, 2017. В 2 т. Т. 1. М.: Изд. дом МЭИ, 2017. С. 171–172.
2. Мессерле В.Е., Устименко А.Б., Аскарова А.С., Нагибин А.О. Горение пылеугольного факела в топке с плазменно-топливной системой // *Теплофизика и аэромеханика*. 2010. Т. 17, № 3. С. 467–476.
3. Ингель Л.Х. Об одном эффекте дифференциальной диффузии в двухкомпонентных средах // *Инж.-физ. журн.* 2017. Т. 90, № 2. С. 465–470.
4. Дильман В.В., Лотхов В.А., Кулов Н.Н., Найденов В.И. Динамика испарения // *Теоретические основы химической технологии*. 2000. Т. 34, № 3. С. 227–236.
5. Косов В.Н., Селезнев В.Д., Жаврин Ю.И. Эффект разделения компонентов при изотермическом смешении тройных газовых систем в условиях свободной конвекции // *Журн. техн. физики*. 1997. Т. 67, № 10. С. 139–140.
6. Дильман В.В., Липатов Д.А., Лотхов В.А., Каминский В.А. Возникновение неустойчивости при нестационарном испарении бинарных растворов в инертный газ // *Теоретические основы химической технологии*. 2005. Т. 39, № 6. С. 600–606.
7. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
8. Nield D.A., Bejan A. *Convection in porous media*. N. Y.: Springer, 2006. 654 p.
9. Косов В.Н., Селезнев В.Д., Жаврин Ю.И. О диффузионной неустойчивости в изотермических трехкомпонентных газовых смесях // *Теплофизика и аэромеханика*. 2000. Т. 7, № 1. С. 127–135.
10. Kossov V.N., Fedorenko O.V., Zhavrin Yu.I., Mukamedenkyzy V. Instability of mechanical equilibrium during diffusion in a three-component gas mixture in a vertical cylinder with a circular cross section // *Technical Physics*. 2014. Vol. 59, No. 4. P. 482–486.
11. Bird B.R., Stewart W.E., Lightfoot E.V. *Transport phenomenon*. N. Y.: John Wiley and Sons, Inc., 2002. 914 p.
12. Косов В.Н., Селезнев В.Д., Жаврин Ю.И. Возникновение инверсии градиента плотности при изотермической диффузии бинарной смеси, в равной степени разбавленной третьим газом // *Теплофизика и аэромеханика*. 1998. Т. 5, № 2. С. 209–214.
13. Каминский В.А., Обвинцева Н.Ю., Калачинская И.С., Дильман В.В. Моделирование конвекции Рэлея в нестационарном процессе испарения // *Математическое моделирование*. 2007. Т. 19, № 11. С. 3–10.
14. Каминский В.А., Обвинцева Н.Ю. Испарение жидкости в условиях конвективной неустойчивости в газовой фазе // *Журн. физ. химии*. 2008. Т. 82, № 7. С. 1368–1373.
15. Косов В.Н., Жакебаев Д.Б., Федоренко О.В. Численный анализ конвективных движений, возникающих при изотермической диффузии в вертикальных каналах в трехкомпонентных газовых смесях // *Известия НАН РК. Серия физ.-мат.* 2017. Т. 5, № 315. С. 134–142.
16. Kossov V., Zhakebayev D., Fedorenko O. Experimental and numerical mass transfer studies in case of convective flows occurrence in isothermal ternary gas mixtures // *Intern. Center for Heat and Mass Transfer. Digital Library. Intern. Symp. Advances in Computational Heat Transfer*. Napoli, Italy, 2017. P. 1971–1985.
17. Полежаев В.И., Бунз А.В., Везуб Н.А., Глушко Г.С., Грязнов В.Л., Дубовик К.Г., Никитин С.А., Простомолов А.И., Федосеев А.И., Черкасов С.Г. Математическое моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье–Стокса. М.: Наука, 1987. 274 с.
18. Navon M. Pent: a periodic penta-diagonal systems solver // *Communications in Applied Numerical Methods*. 1987. Vol. 3, No. 1. P. 63–69.

19. **Kim J., Moin P.** Application of a fractional-step method to incompressible Navier–Stokes equations // J. Computational Physics. 1985. Vol. 59. P. 308–323.
20. **Abdibekova A.U., Zhakebayev D.B., Zhumagulov B.T.** The decay of mhd turbulence depending on the conducting properties of environment // Magnetohydrodynamics. 2014. Vol. 50, No. 2. P. 121–138.
21. **Айткожаев А.З., Жаврин Ю.И., Косов В.Н., Косов Н.Д.** Концентрационная конвекция в изотермических трехкомпонентных газовых смесях с балластным газом // Докл. НАН РК. 1993. № 2. С. 21–26.
22. **Косов В.Н., Селезнев В.Д.** Аномальное возникновение свободной гравитационной конвекции в изотермических тройных газовых смесях. Екатеринбург: УрО РАН, 2004. 151 с.

*Статья поступила в редакцию 25 мая 2018 г.,  
после доработки — 31 июля 2018 г.,  
принята к публикации 11 октября 2018 г.*