

А.С. Жұмали^{1,*} , В.Н. Косов² , Б.А. Сатенова¹ , А. Асылбекулы¹ 

¹Казахский национальный университет имени аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан

²Казахский национальный педагогический университет имени Абая, г. Алматы, Казахстан

*e-mail: ainura.z89@gmail.com

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ КОНВЕКЦИИ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ДАВЛЕНИЯХ И СОСТАВАХ ТРЕХКОМПОНЕНТНОЙ ГАЗОВОЙ СМЕСИ

В данной статье рассматривается математическое и компьютерное моделирование влияния давления и состава трехкомпонентной газовой смеси на концентрационную конвекцию на основе решения системы уравнений Навье–Стокса, уравнения неразрывности и уравнений для концентрации компонентов трехкомпонентной газовой смеси. Исследуется процесс, когда тяжелый газ и легкий газ находятся в верхней части ограниченной полости формы параллелепипеда, а средний газ находится в нижней части. Численные расчеты были проведены для систем $0.55Ar+0.45He-N_2$, $0.66Ar+0.34He-N_2$, $0.55CO_2+0.45He-N_2$ на равномерной прямоугольной сетке. В виде рисунков была представлена динамика изменения концентраций аргона и диоксида углерода для этих систем при различных значениях давления. Результаты численного исследования получены с помощью 3D численного алгоритма, осуществленного на базе D3Q27 модели метода решеточных уравнений Больцмана (LBM) в аппроксимации Батнагара-Гросса-Крука (BGK). Проведенные расчеты показывают, что в трехкомпонентных газовых смесях при определенных давлениях и составах возможен сложный массоперенос, связанный с возникновением конвективных возмущений. Для проверки численного алгоритма, результаты, полученные в данной статье, были сравнены с результатами, полученными экспериментальным путем, и показали хорошее согласование.

Ключевые слова: Диффузия, концентрационная конвекция, давление, неустойчивость, решеточный метод Больцмана.

А.С. Жұмәлі^{1,*}, В.Н. Косов², Б.А. Сатенова¹, А. Асылбекұлы¹

¹Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан

²Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы қ., Қазақстан

*e-mail: ainura.z89@gmail.com

Үшкомпонентті газ қоспасындағы әр түрлі қысым мен құрамға байланысты концентрациялық конвекцияны моделдеу

Бұл мақалада Навье–Стокс теңдеулер жүйесі, үзіліссіздік теңдеуі және үш компонентті қоспа компоненттерінің концентрацияларын сипаттауға арналған теңдеулерді шешу негізінде үшкомпонентті газ қоспасындағы әр түрлі қысым мен қоспа құрамы өзгерісінің концентрациялық конвекция үрдісіне әсерін математикалық және компьютерлік моделдеу баяндалады. Ауыр газ және жеңіл газ параллелепипед формасындағы шектеулі ортаның жоғарғы жағында, ал орташа тығыздықтағы газ төменгі жағында орналасқан жағдайдағы процесс зерттеледі. Сандық есептеулер $0.55Ar+0.45He-N_2$, $0.66Ar+0.34He-N_2$ және $0.55CO_2+0.45He-N_2$ жүйелері үшін бірқалыпты тікбұрышты торда жүргізілді. Қысымның әр түрлі мәндері берілген кездегі аталмыш жүйелер үшін аргон және көміртек диоксиды концентрацияларының өзгеріс динамикасы суреттер түрінде көрсетіледі. Сандық зерттеу нәтижелері Батнагар-Гросс-Крук (BGK) аппроксимациясы қолданылған Больцман торлы теңдеулері әдісінің (LBM) D3Q27 моделі негізінде құрылған 3D сандық алгоритмі көмегімен алынған. Жүргізілген есептеулер бойынша, үшкомпонентті газ қоспаларында белгілі бір қысым мен құрам үшін конвективті ауытқулармен байланысты күрделі массатаралу болу мүмкіндігі анықталды. Сандық алгоритмді тексеру мақсатында бұл мақаланы жазу барысында алынған нәтижелер эксперименталды жолмен алынған нәтижелермен салыстырылып отырып, жақсы келісім бергенін атап өту керек.

Түйін сөздер: диффузия, концентрациялық конвекция, қысым, орнықсыздық, Больцман торлы әдісі.

A.S. Zhumali^{1,*}, V.N. Kossov², B.A. Satenova¹, A. Assylbekuly¹

¹Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

²Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: ainura.z89@gmail.com

Simulation of concentration convection at different pressures and compositions of a three-component gas mixture

This article discusses the mathematical and computer modeling of the influence of pressure and composition of a three-component gas mixture on concentration convection based on the solution of the Navier-Stokes equations system, the continuity equation and equations for the concentration of the mixture components. The process is investigated when heavy gas and light gas are in the upper part of the parallelepiped, and gas with intermediate density in the lower part. Numerical calculations were carried out for the systems $0.55Ar+0.45He-N_2$, $0.66Ar+0.34He-N_2$, $0.55CO_2+0.45He-N_2$ on a uniform rectangular grid. The dynamics of changes in the concentrations of argon and carbon dioxide for these systems at various pressures were presented in the form of figures. The results of the numerical study were obtained using a 3D numerical algorithm implemented on the basis of the D3Q27 model Lattice Boltzmann equations method with Batnagar-Gross-Crook (BGK) approximation. The performed calculations show that complex mass transfer is possible, associated with the occurrence of convective disturbances in three-component gas mixtures at certain pressures and compositions. To test the numerical algorithm, the results obtained in this article were compared with the results obtained experimentally and showed good agreement.

Key words: diffusion, concentration convection, pressure, instability, Lattice Boltzmann method.

1 Введение

Исследование концентрационной гравитационной конвекции в многокомпонентной газовой смеси является актуальной задачей на сегодняшний день. Л.Миллер, Т.Сперлинг и Е.Мэйсон [1] при исследовании термоэффекта в трехкомпонентных газовых смесях в вертикальных диффузионных каналах обнаружили, что изменение температуры вблизи границы раздела газов для ряда систем имело вид нерегулярных колебаний, хотя ожидалось ее монотонное нарастание. Такое поведение газовых смесей при диффузии связано с инверсией плотности вызванной неустойчивостью механического равновесия смеси. Дальнейшее детальное исследование диффузионной неустойчивости с помощью экспериментальных методов в работах [2–6] показало существенное влияние на интенсивность конвективного смешения таких параметров как давление, исходный состав смеси, геометрических характеристик диффузионного канала и угла его наклона.

При определенных ситуациях связанных с увеличением числа компонентов газовой смеси, изменении геометрических характеристик каналов, и т.д. проведение экспериментов становится затруднительным и дорогостоящим. В таких случаях важное значение приобретают численные методы исследования. Существует множество работ по исследованию процесса с применением различных численных методов [7–10]. Все эти работы имеют общий характер - описываются лишь эффекты безразмерных величин, таких как число Прандтля, число Рэлея, число Грасгофа, число Льюиса и т.д., на исследуемый процесс. Однако зависимость этих величин от термодинамических параметров не учитываются. Основное отличие этих работ – выбор методов численной реализации.

Целью данной работы является описание численным путем влияния давления и состава газовой смеси исследуемого объекта на процесс концентрационной конвекции. До настоя-

щего времени авторами работ [11, 12] было проведено 2D численное моделирование влияния указанных выше термодинамических параметров на интенсивность конвективного смешения, вызванного неустойчивостью механического равновесия исследуемой системы. Для описания рассматриваемого физико-химического процесса наиболее точно, в данной работе проводится 3D численное моделирование. Оно осуществляется на базе D3Q27 модели решеточного метода Больцмана (LBM) [13].

Для проверки численного алгоритма, результаты, полученные в данной статье, были сравнены с результатами, полученными экспериментальным путем, и показали хорошее согласование.

2 Постановка задачи

Исследуемый процесс рассматривается в ограниченной области в форме параллелепипеда (Рисунок 1). В верхней части параллелепипеда находятся легкий газ и тяжелый газ, а в нижней части – средний по плотности газ. Числа 1, 2 и 3 в рисунке 1 обозначают легкий, тяжелый и средний газы, соответственно.

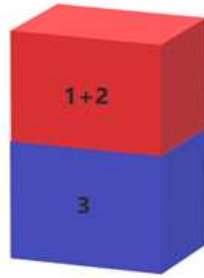


Рисунок 1 – Целевая область

Система возмущенных уравнений в трехмерном пространстве в приближении Буссинеска имеет следующий вид:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0,$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu_f \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right),$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu_f \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right),$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu_f \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) -$$

$$-g [1 + \beta_{C_1} (C_1 - C_1^r) + \beta_{C_2} (C_2 - C_2^r)],$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + u \frac{\partial C_1}{\partial x} + v \frac{\partial C_1}{\partial y} + w \frac{\partial C_1}{\partial z} = D_{11}^* \left(\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_1}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_1}{\partial z^2} \right) + D_{12}^* \left(\frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_2}{\partial z^2} \right),$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} + u \frac{\partial C_2}{\partial x} + v \frac{\partial C_2}{\partial y} + w \frac{\partial C_2}{\partial z} = D_{21}^* \left(\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_1}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_1}{\partial z^2} \right) + D_{22}^* \left(\frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_2}{\partial z^2} \right),$$

$$C_1 + C_2 + C_3 = 1,$$

где u, v, w – компоненты скорости, p – давление, ρ – плотность, T – температура, C_i – концентрация i -го компонента, ν_f – кинематическая вязкость, D_{ij}^* – практические коэффициенты диффузии, t – время, α – коэффициент термодиффузии, C_i^r – значение эталонной концентрации i -го компонента, β_{C_1} – коэффициент объемного расширения для C_1 , β_{C_2} – коэффициент объемного расширения для C_2 . Связь практических коэффициентов диффузии D_{ij}^* с коэффициентами взаимной диффузии D_{ij} [14] определяется соотношениями:

$$D_{11}^* = \frac{D_{13} [C_1 D_{32} + (C_2 + C_3) D_{12}]}{D}, \quad D_{12}^* = -\frac{C_1 D_{23} [D_{12} - D_{13}]}{D},$$

$$D_{22}^* = \frac{D_{23} [C_2 D_{13} + (C_1 + C_2) D_{12}]}{D}, \quad D_{21}^* = -\frac{C_2 D_{13} [D_{12} - D_{23}]}{D}, \quad (1)$$

$$D = C_1 D_{23} + C_2 D_{13} + C_3 D_{12}.$$

Система уравнений имеет следующие начальные и граничные условия:

$$u = 0, \quad v = 0, \quad w = 0, \quad \text{при } t = 0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq y \leq W, \quad 0 \leq z \leq H$$

$$C_1 = 0, \quad C_2 = 0, \quad C_3 = X_3, \quad \text{при } t = 0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq y \leq W, \quad 0 \leq z \leq H/2$$

$$C_1 = X_1, \quad C_2 = X_2, \quad C_3 = 0, \quad \text{при } t = 0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq y \leq W, \quad H/2 \leq z \leq H$$

$$u = 0, \quad v = 0, \quad w = 0, \quad \frac{\partial C_i}{\partial x} = 0, \quad \text{при } x = 0, \quad 0 \leq y \leq W, \quad 0 \leq z \leq H$$

$$u = 0, \quad v = 0, \quad w = 0, \quad \frac{\partial C_i}{\partial x} = 0, \quad \text{при } x = L, \quad 0 \leq y \leq W, \quad 0 \leq z \leq H$$

$$u = 0, \quad v = 0, \quad w = 0, \quad \frac{\partial C_i}{\partial y} = 0, \quad \text{при } y = 0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq z \leq H$$

$$u = 0, \quad v = 0, \quad w = 0, \quad \frac{\partial C_i}{\partial y} = 0, \quad \text{при } y = W, \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq z \leq H$$

$$u = 0, \quad v = 0, \quad w = 0, \quad \frac{\partial C_i}{\partial z} = 0, \quad \text{при } z = 0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq y \leq W$$

$$u = 0, \quad v = 0, \quad w = 0, \quad \frac{\partial C_i}{\partial z} = 0, \quad \text{при } z = H, \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq y \leq W$$

Система уравнений может быть приведена к безразмерному виду с использованием следующих безразмерных величин:

$$x^* = \frac{x}{L}, \quad y^* = \frac{y}{W}, \quad z^* = \frac{z}{H},$$

$$u^* = \frac{u}{U_0}, \quad v^* = \frac{v}{U_0}, \quad w^* = \frac{w}{U_0}, \quad U_0 = \frac{\alpha}{H};$$

$$C_i^* = \frac{C_i - C_i^r}{\Delta C_i}, \quad p^* = \frac{pL^2}{\rho\alpha^2},$$

$$Le_{ij} = \frac{\alpha}{D_{ij}^*}, \quad \text{Pr} = \frac{\nu_f}{\alpha}, \quad (2)$$

$$Gr_{C_1} = \frac{g\beta_{C_1}\Delta C_1 H^3}{\nu_f^2}, \quad Gr_{C_2} = \frac{g\beta_{C_2}\Delta C_2 H^3}{\nu_f^2}, \quad (3)$$

$$N = \frac{Gr_{C_2}}{Gr_{C_1}}, \quad t^* = \frac{\alpha t}{H^2}.$$

где u^* , v^* , w^* – безразмерные компоненты скорости, U_0 – характерная скорость, p^* – безразмерное давление, C_i^* – безразмерная концентрация i -го компонента, $\Delta C_i = C_i^{\max} - C_i^{\min}$, C_i^{\max} – максимальное значение концентрации i -го компонента, C_i^{\min} – минимальное значение концентрации i -го компонента, t^* – безразмерное время, Pr – число Прандтля, Le – число Льюиса, Gr – число Грасгофа.

Уравнения принимают следующий безразмерный вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v^*}{\partial y^*} + \frac{\partial w^*}{\partial z^*} &= 0, \\ \frac{\partial u^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*} + w^* \frac{\partial u^*}{\partial z^*} &= -\frac{\partial p^*}{\partial x^*} + \text{Pr} \left(\frac{\partial^2 u^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 u^*}{\partial z^{*2}} \right), \\ \frac{\partial v^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial v^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial v^*}{\partial y^*} + w^* \frac{\partial v^*}{\partial z^*} &= -\frac{\partial p^*}{\partial y^*} + \text{Pr} \left(\frac{\partial^2 v^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 v^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 v^*}{\partial z^{*2}} \right), \\ \frac{\partial w^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial w^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial w^*}{\partial y^*} + w^* \frac{\partial w^*}{\partial z^*} &= -\frac{\partial p^*}{\partial z^*} + \text{Pr} \left(\frac{\partial^2 w^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 w^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 w^*}{\partial z^{*2}} \right) - Gr_{C_1} \text{Pr} (C_1^* + N C_2^*), \\ \frac{\partial C_1^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial C_1^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial C_1^*}{\partial y^*} + w^* \frac{\partial C_1^*}{\partial z^*} &= \\ &= \frac{1}{Le_{11}} \left(\frac{\partial^2 C_1^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 C_1^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 C_1^*}{\partial z^{*2}} \right) + \frac{1}{Le_{12}} \left(\frac{\partial^2 C_2^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 C_2^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 C_2^*}{\partial z^{*2}} \right), \\ \frac{\partial C_2^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial C_2^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial C_2^*}{\partial y^*} + w^* \frac{\partial C_2^*}{\partial z^*} &= \\ &= \frac{1}{Le_{21}} \left(\frac{\partial^2 C_1^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 C_1^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 C_1^*}{\partial z^{*2}} \right) + \frac{1}{Le_{22}} \left(\frac{\partial^2 C_2^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 C_2^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 C_2^*}{\partial z^{*2}} \right), \\ \sum_{i=1}^3 (C_i^* \Delta C_i + C_i^r) &= 1. \end{aligned}$$

Диффузионные члены $\frac{1}{Le_{12}} \left(\frac{\partial^2 C_2^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 C_2^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 C_2^*}{\partial z^{*2}} \right)$ и $\frac{1}{Le_{21}} \left(\frac{\partial^2 C_1^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 C_1^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 C_1^*}{\partial z^{*2}} \right)$ в правой части уравнений концентрации компонентов будут рассматриваться в качестве источников. Обозначим их через q_1 и q_2 соответственно.

Безразмерные начальные и граничные условия:

$$\begin{aligned} u^* = 0, \quad v^* = 0, \quad w^* = 0 \quad &\text{при } t^* = 0, \quad 0 \leq x^* \leq 1/2, \quad 0 \leq y^* \leq 1/6, \quad 0 \leq z^* \leq 1 \\ C_1^* = 0, \quad C_1^* = 0, \quad C_1^* = 1, \quad &\text{при } t^* = 0, \quad 0 \leq x^* \leq 1/2, \quad 0 \leq y^* \leq 1/6, \quad 0 \leq z^* \leq 1/2 \\ C_1^* = 1, \quad C_2^* = 1, \quad C_3^* = 0, \quad &\text{при } t^* = 0, \quad 0 \leq x^* \leq 1/2, \quad 0 \leq y^* \leq 1/6, \quad 1/2 \leq z^* \leq 1 \\ u^* = 0, \quad v^* = 0, \quad w^* = 0, \quad &\frac{\partial C_i^*}{\partial x^*} = 0, \quad \text{при } x^* = 0, \quad 0 \leq y^* \leq 1/6, \quad 0 \leq z^* \leq 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 u^* = 0, \quad v^* = 0, \quad w^* = 0, \quad \frac{\partial C_i^*}{\partial x^*} = 0, \quad \text{при } x^* = 1/2, \quad 0 \leq y^* \leq 1/6, \quad 0 \leq z^* \leq 1 \\
 u^* = 0, \quad v^* = 0, \quad w^* = 0, \quad \frac{\partial C_i^*}{\partial y^*} = 0, \quad \text{при } y^* = 0, \quad 0 \leq x^* \leq 1/2, \quad 0 \leq z^* \leq 1 \\
 u^* = 0, \quad v^* = 0, \quad w^* = 0, \quad \frac{\partial C_i^*}{\partial y^*} = 0, \quad \text{при } y^* = 1/6, \quad 0 \leq x^* \leq 1/2, \quad 0 \leq z^* \leq 1 \\
 u^* = 0, \quad v^* = 0, \quad w^* = 0, \quad \frac{\partial C_i^*}{\partial z^*} = 0, \quad \text{при } z^* = 0, \quad 0 \leq x^* \leq 1/2, \quad 0 \leq y^* \leq 1/6 \\
 u^* = 0, \quad v^* = 0, \quad w^* = 0, \quad \frac{\partial C_i^*}{\partial z^*} = 0, \quad \text{при } z^* = 1, \quad 0 \leq x^* \leq 1/2, \quad 0 \leq y^* \leq 1/6
 \end{aligned}$$

3 Численный метод

Численное решение в данной работе строится на D3Q27 модели решеточного метода Больцмана [13]. Решеточное уравнение Больцмана в аппроксимации Батнагара-Гросса-Крука (BGK) выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}
 f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) &= \Delta t \left[-\frac{f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau_f} + F_i \right] \\
 h_{i,\alpha}(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - h_{i,\alpha}(\vec{x}, t) &= \Delta t \left[-\frac{h_{i,\alpha}(\vec{x}, t) - h_{i,\alpha}^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau_{h,\alpha}} + Q_{i,\alpha} \right]
 \end{aligned}$$

где $f_i, h_{i,\alpha}$ – функции распределения скорости и концентрации компонентов, \vec{e}_i – дискретная решеточная скорость, $\tau_f, \tau_{h,\alpha}$ – время релаксации, F_i – компонент внешней силы, $Q_{i,\alpha}$ отвечает за источник $q_\alpha, \Delta t$ – решеточный шаг по времени, $f_i^{eq}, h_{i,\alpha}^{eq}$ – равновесная функция распределения скорости и концентрации соответственно.

Равновесные функции определены следующими формулами:

$$\begin{aligned}
 f_i^{eq} &= \omega_i \rho \left[1 + 3 \frac{\vec{e}_i \vec{u}^{eq}}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(\vec{e}_i \vec{u}^{eq})^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{\vec{u}^{eq} \vec{u}^{eq}}{c^2} \right] \\
 h_{i,\alpha}^{eq} &= \omega_i C_\alpha \left[1 + 3 \frac{\vec{e}_i \vec{u}^{eq}}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(\vec{e}_i \vec{u}^{eq})^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{\vec{u}^{eq} \vec{u}^{eq}}{c^2} \right]
 \end{aligned}$$

где $c = \Delta x / \Delta t$, Δx и Δt решеточный шаг по пространству и времени, которые равны единице. Далее показаны значения весов по всем направлениям:

$$\omega_i = \begin{cases} 8/27, & i = 0, \\ 2/27, & i = 1 - 6, \\ 1/54, & i = 7 - 18, \\ 1/216, & i = 19 - 26, \end{cases}$$

В модели D3Q27 (Рисунок 2) дискретные скорости вычисляются по следующей формуле:

$$\vec{e}_i = \begin{cases} (0, 0, 0)c, & i = 0, \\ (\pm 1, 0, 0)c, (0, \pm 1, 0)c, (0, 0, \pm 1)c, & i = 1 - 6, \\ (\pm 1, \pm 1, 0)c, (0, \pm 1, \pm 1)c, (\pm 1, 0, \pm 1)c, & i = 7 - 18, \\ (\pm 1, \pm 1, \pm 1)c, & i = 19 - 26, \end{cases}$$

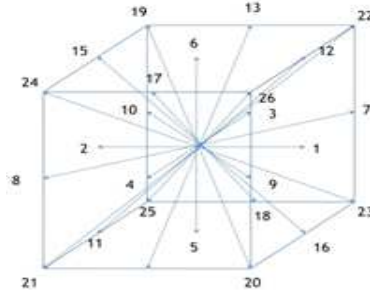


Рисунок 2 – Модель D3Q27

В данной работе для аппроксимации внешней силы $\vec{F} = \rho_r g [\beta_{C_1} (C_1 - C_r) + \beta_{C_2} (C_2 - C_r)]$ в LBM используется схема, предложенная Гуо и др. [15]:

$$F_i = \omega_i \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau_f} \right) \left[\frac{\vec{e}_i - \vec{u}}{c_s^2} + \frac{\vec{e}_i(\vec{e}_i \cdot \vec{u})}{c_s^4} \right] \cdot \vec{F}$$

Для аппроксимации источников q_α в LBM используется схема, предложенная Сета [16]:

$$Q_{i,\alpha} = \omega_i \left(1 - \frac{1}{2\tau_{h,\alpha}} \right) q_\alpha$$

Уравнение эволюции делится на два шага, столкновение и распространение:

1.
$$\begin{aligned} \tilde{f}_i(\vec{x}, t) &= f_i(\vec{x}, t) + \Delta t \left(-\frac{f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau_f} + F_i \right), \\ \tilde{h}_{i,\alpha}(\vec{x}, t) &= h_{i,\alpha}(\vec{x}, t) + \Delta t \left(-\frac{h_{i,\alpha}(\vec{x}, t) - h_{i,\alpha}^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau_{h,\alpha}} + Q_{i,\alpha} \right), \end{aligned}$$
2.
$$\begin{aligned} \bar{f}_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) &= \tilde{f}_i(\vec{x}, t), \\ \bar{h}_{i,\alpha}(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) &= \tilde{h}_{i,\alpha}(\vec{x}, t). \end{aligned}$$

После второго шага необходимо обновить макропараметры (плотность, скорость, концентрация) по следующим формулам:

$$\rho = \sum_{i=0}^{26} \bar{f}_i, \quad \rho \vec{u} = \sum_{i=0}^{26} \bar{f}_i \vec{e}_i + \frac{\Delta t}{2} \vec{F}, \quad C_\alpha = \sum_{i=0}^{26} \left(\bar{h}_{i,\alpha} + \frac{\Delta t}{2} Q_{i,\alpha} \right).$$

Для замыкания системы уравнений были использованы следующие граничные условия. Условие нулевой скорости для всех стенок:

$$\bar{f}_i(\vec{x}_w, t + \Delta t) = \bar{f}_{-i}(\vec{x}_w, t + \Delta t), \quad \vec{e}_i \cdot \vec{n} > 0,$$

Условие Неймана для концентрации на всех стенках:

$$\bar{h}_{i,\alpha}(\vec{x}_w, t + \Delta t) = \bar{h}_{-i,\alpha}(\vec{x}_w, t + \Delta t), \quad \vec{e}_i \cdot \vec{n} > 0.$$

4 Результаты и обсуждение

Численные расчеты были проведены для систем $0.55Ar+0.45He-N_2$, $0.66Ar+0.34He-N_2$, $0.55CO_2+0.45He-N_2$ на равномерной прямоугольной сетке размером $30 \times 10 \times 60$. Числа перед химическими элементами соответствуют концентрациям компонентов в мольных долях в исследуемых газовых смесях. Давление выбиралось в диапазоне $p \approx 0.5 \div 2.5$ при $T = 298 K$. Шаг по времени принимался равным 0.001 секунд. Вычислительная область имеет форму параллелепипеда, длина, ширина и высота которого равны 0.025 м, 0.003 м и 0.17 м соответственно. Необходимые физические параметры компонентов газовых смесей указаны в Таблице 1.

Таблица 1 – Физические параметры компонентов газовых смесей при $p_0 = 0.1$ МПа, $T_0 = 298 K$

Компоненты	ρ^0 , (кг/м ³)	η^0 , 10 ⁻⁵ (Па с)	D_{12}^0 , 10 ⁻⁴ (м ² /с)	D_{13}^0 , 10 ⁻⁴ (м ² /с)	D_{23}^0 , 10 ⁻⁴ (м ² /с)	Молярная масса m , 10 ⁻³ (кг/моль)
CO ₂ (2)+ He(1) – N ₂ (3)						
CO ₂	1.9753	1.463				44.009
He	0.18	1.946	0.584	0.713	0.165	4.003
N ₂	1.25	1.766				28.016
Ar(2) + He(1) – N ₂ (3)						
Ar	1.662	2.215				39.944
He	0.18	1.946	0.708	0.7437	0.221	4.003
N ₂	1.125	1.766				28.016

Обозначим через $Kp = \frac{p_0}{p}$ и $Kt = \frac{T}{T_0}$ поправочные коэффициенты по давлению и температуре, соответственно. Здесь, p_0 и T_0 – давление и температура при нормальных условиях ($p_0 = 0.1$ МПа, $T_0 = 298 K$), p и T – давление и температура опыта. С помощью поправочных коэффициентов находятся параметры эксперимента. Плотность компонентов к параметрам опыта приводится по формуле:

$$\rho_i = \frac{\rho_i^0}{Kp Kt},$$

где ρ_i^0 – плотность i -го компонента при нормальных условиях. Динамическая сдвиговая вязкость к параметрам опыта приводится по формуле:

$$\eta_i = \eta_i^0 Kt^{\frac{1}{2}},$$

где η_i^0 – динамическая вязкость i -го компонента при нормальных условиях. Формула для нахождения кинематической вязкости:

$$v_f = \sum_i C_i \frac{\eta_i}{\rho_i},$$

где C_i - концентрация i -го компонента. Взаимные коэффициенты диффузии опыта определяются следующими формулами:

$$D_{12} = D_{12}^0 K t^{\frac{3}{2}} K p, D_{13} = D_{13}^0 K t^{\frac{3}{2}} K p, D_{23} = D_{23}^0 K t^{\frac{3}{2}} K p,$$

где D_{ij}^0 - коэффициенты диффузии при нормальных условиях. Практические коэффициенты диффузии D_{ij}^* находятся соотношениями (1). Коэффициенты объемного расширения вычисляются следующим образом:

$$\beta_{C_1} = \frac{m_1 - m_3}{H} (C_1 m_1 + C_2 m_2 + C_3 m_3), \beta_{C_2} = \frac{m_2 - m_3}{H} (C_1 m_1 + C_2 m_2 + C_3 m_3),$$

где m_i - молярная масса i -го компонента.

С помощью вышеуказанных параметров опыта можно вычислить необходимые безразмерные величины (2), (3). На рисунках 3-5 представлены результаты численного моделирования диффузионного и конвективного смешения для систем $0.55Ar+0.45He-N_2$, $0.66Ar+0.34He-N_2$, $0.55CO_2+0.45He-N_2$. Экспериментальное исследование этих систем описано в работах [3; 5; 6]. На рисунке 3 представлены изоповерхности концентрации аргона для системы $0.55Ar+0.45He-N_2$ при различных значениях давления. В системе наблюдается диффузионный процесс. На рисунке 4 изображена динамика изменения концентрации аргона для системы $0.66Ar+0.34He-N_2$. Сравнение рисунков 3 и 4 показывает, что с увеличением количества компонента с наибольшей молярной массой в исходном составе смеси, интенсивность его переноса становится значительно больше, чем для системы с меньшим исходным содержанием аргона. На рисунке 5 показана динамика изменения концентрации тяжелого газа для тройной системы, где место аргона замещает диоксид углерода. В этом случае заметно, что увеличение давления влияет на стабильность механического равновесия. Это происходит в связи с тем, что молярная масса диоксида углерода больше массы аргона.

Таким образом, проведенные эксперименты показали, что в трехкомпонентных газовых смесях при определенных давлениях и составах возможно возникновение сложного массопереноса, связанного с возникновением конвективных возмущений.

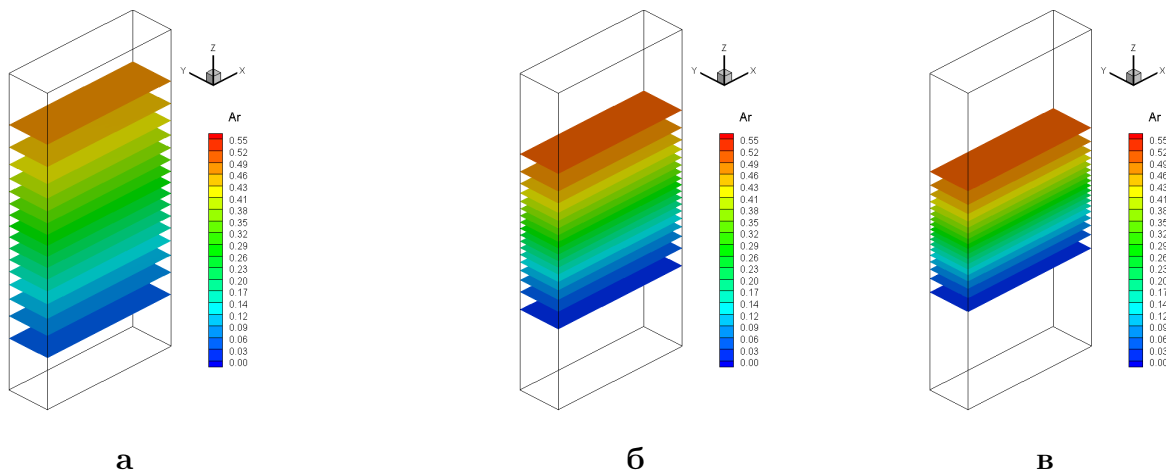


Рисунок 3 – Динамика изменения концентрации в системе $0.55Ar+0.45He-N_2$ при: а) $P=0.5$ МПа; б) $P=1.5$ Мпа; в) $P=2.5$ Мпа.

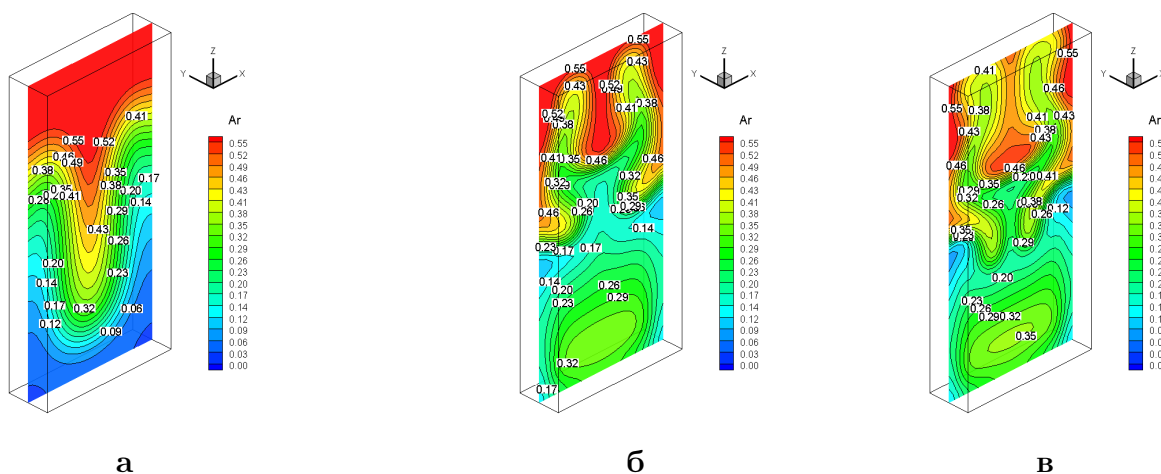


Рисунок 4 – Динамика изменения концентрации в системе $0.66Ar+0.34He-N_2$ при: а) $P=0.5$ МПа; б) $P=1.5$ МПа; в) $P=2.5$ МПа.

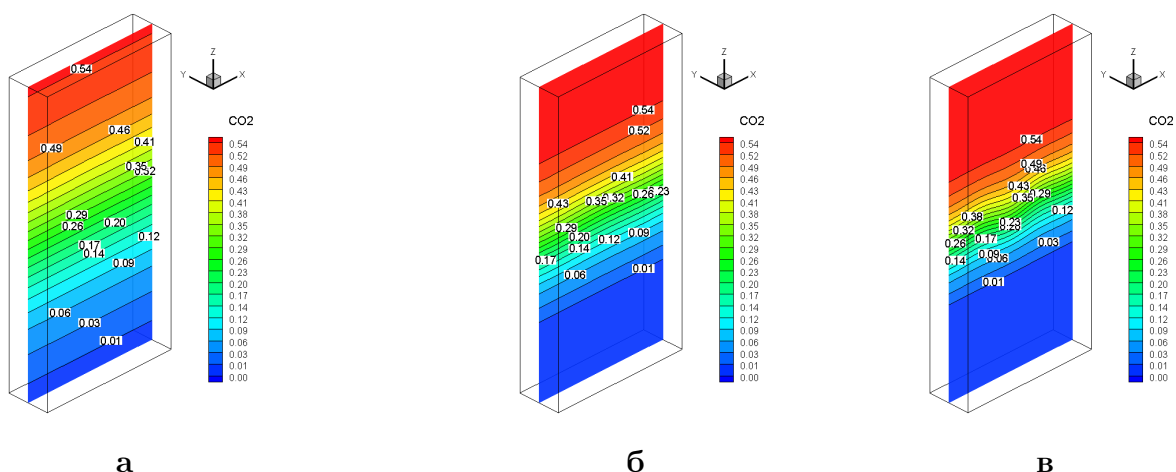


Рисунок 5 – Динамика изменения концентрации в системе $0.55CO_2+0.45He-N_2$ при: а) $P=0.5$ МПа; б) $P=1.5$ МПа; в) $P=2.5$ МПа.

5 Заключение

На основе проведенных исследований были сделаны нижеследующие выводы.

Была разработана математическая модель для моделирования сложного массопереноса в тройных газовых смесях при различных давлениях.

Был разработан 3D численный алгоритм на базе D3Q27 модели решеточного метода Больцмана для моделирования массопереноса компонентов концентрации в ограниченной полости формы параллелепипеда.

На основе численного моделирования трехкомпонентных смесей $0.55Ar+0.45He-N_2$, $0.66Ar+0.34He-N_2$, $0.55CO_2+0.45He-N_2$, исследованы влияние давления и исходного состава компонентов на устойчивость диффузионного процесса.

Таким образом, поставленные задачи выполнены полностью.

6 Благодарности

Работа выполнена при поддержке грантового финансирования проекта Министерством образования и науки Республики Казахстан (грант № AP08053154).

Список литературы

- [1] Miller L., Spurling T.H., Mason E.A. Instabilities in ternary diffusion // *Phys. Fluids*. – 1967. – №8(10). – P. 1809-1811.
- [2] Жаврин Ю.И., Косов Н.Д., Белов С.М., Семидоцкая Н.И. О применении метода эффективных коэффициентов к описанию диффузии в многокомпонентных газовых смесях при повышенных давлениях // *Тепломассоперенос в жидкостях и газах: сб. науч. тр.* – Алма-Ата, 1982. – С. 3-12.
- [3] Белов С.М., Жаврин Ю.И., Косов Н.Д. Диффузионная неустойчивость газовой смеси гелий-аргон-азот при различных давлениях и концентрациях / Алма-Ата: КазГУ, 1985. – 13 с. – Деп. в КазНИИНТИ 14.10.85. - № 1073.
- [4] Жаврин Ю.И., Косов В.Н. Влияние длины канала на устойчивость диффузионного процесса в многокомпонентных газовых смесях // *Вест. АН КазССР*. – 1991. - № 10. – С. 63-65.
- [5] Косов В.Н., Кульжанов Д.У., Жаврин Ю.И., Красиков С.А., Федоренко О.В. Особенности разделения углеводородных газовых смесей при конвективной диффузии. - Алматы: MV-Принт, 2014. – 144 с.
- [6] Asembaeva M.K., Kosov V.N., Krasikov S.A., Fedorenko O.V. Effect of the Channel Inclination Angle on Convective Mixing Caused by Instability of Mechanical Equilibrium of Ternary Gas Mixture at Isothermal Diffusion // *Technical Physics Letters*. – 2019. - №11(45). - P. 1071–1074.
- [7] Kassem Ghorayeb, Abdelkader Mojtabi. Double diffusive convection in a vertical rectangular cavity // *Physics of Fluids, American Institute of Physics*. – 1997. - № 9 (8). - P. 2339 - 2348.
- [8] Qinlong Ren, Cho Lik Chan. Numerical study of double-diffusive convection in a vertical cavity with Soret and Dufour effects by lattice Boltzmann method on GPU // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 2016. - Vol. 93. – P. 538–553.
- [9] Pascale Garaud. Double-Diffusive Convection at Low Prandtl Number // *Annu. Rev. Fluid Mech.* – 2018. – Vol. 50. – P. 275-298.
- [10] Hongtao Xu, Zhuqing Luo, Qin Lou, Shuanyang Zhang, Jun Wang. Lattice Boltzmann simulations of the double-diffusive natural convection and oscillation characteristics in an enclosure with Soret and Dufour effects // *International Journal of Thermal Sciences*. – 2019. – Vol. 136. – P. 159–171.
- [11] Косов В.Н., Жакебаев Д.Б., Федоренко О.В. Численный анализ конвективных движений, возникающих при изотермической диффузии в вертикальных каналах в трехкомпонентных газовых смесях // *News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan - physico-mathematical series*. - 2017. – Vol. 5. – P. 134-142.
- [12] Косов В.Н., Федоренко О.В., Жакебаев Д.Б., Кизбаев А.П. Особенности возникновения структурированных формирований на границе смены режимов «диффузия – концентрационная конвекция» при изотермическом смешении бинарной смеси в равной степени разбавленной третьим компонентом // *Теплофизика и аэромеханика*. – 2019. – P. 31-40.
- [13] T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, E.M. Viggien. *The Lattice Boltzmann Method*. – Switzerland: Springer International Publishing, 2017. - 61–293 p.
- [14] Bird B.R., Stewart W.E., Lightfoot E.V. *Transport phenomenon*. – New York: John Wiley and Sons, Inc., 2002. – 914 p.
- [15] Guo Z., Zheng C., Shi B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method // *Phys. Rev. E*. - 2002. - № 65. - С. 1–6.
- [16] Seta T. Implicit temperature-correction-based immersed-boundary thermal lattice Boltzmann method for the simulation of natural convection // *Phys. Rev. E*. - 2013. - № 87.

References

- [1] Miller L., Spurling T.H., Mason E.A., "Instabilities in ternary diffusion", *Phys. Fluids*, **10**:8(1967), 1809-1811.
- [2] Zhavrin Y.I., Kossov N.D., Belov S.M., Semidotskaya N.I., "O primeneniі metoda effektivnykh koeffitsiyentov k opisaniyu diffuzii v mnogokomponentnykh gazovykh smesyakh pri povyshennykh davleniyakh [On the application of the effective coefficient method to the description of diffusion in multicomponent gas mixtures at elevated pressures]", *Teplomassoperenos v zhidkostyakh i gazakh: sb. nauch. tr.* (1982), 3-12 [in Russian].
- [3] Belov S.M., Zhavrin YU.I., Kosov N.D., *Diffuzionnaya neustoychivost' gazovoy smesi geliy-argon-azot pri razlichnykh davleniyakh i kontsentratsiyakh* [Diffusion instability of a helium-argon-nitrogen gas mixture at various pressures and concentrations](Dep. in KazNIINTI 10/14/85. - №1073. Alma-Ata: KazGU, 1985), 13 [in Russian].
- [4] Zhavrin YU.I., Kosov V.N., "Vliyaniye dliny kanala na ustoychivost' diffuzionnogo protsessa v mnogokomponentnykh gazovykh smesyakh. [Influence of the channel length on the stability of the diffusion process in multicomponent gas mixtures]", *Vest. AN KazSSR* 10 (1991), 63-65 [in Russian].
- [5] Kosov V.N., Kul'zhanov D.U., Zhavrin YU.I., Krasikov S.A., Fedorenko O.V., *Osobennosti razdeleniya uglevodorodnykh gazovykh smesey pri konvektivnoy diffuzii* [Features of the separation of hydrocarbon gas mixtures during convective diffusion] (Almaty: MV-Print, 2014), 144 [in Russian].
- [6] Asembaeva M.K., Kosov V.N., Krasikov S.A., Fedorenko O.V., "Effect of the Channel Inclination Angle on Convective Mixing Caused by Instability of Mechanical Equilibrium of Ternary Gas Mixture at Isothermal Diffusion", *Technical Physics Letters* **45**:11 (2019), 1071–1074.
- [7] Kassem Ghorayeb, Abdelkader Mojtabi, "Double diffusive convection in a vertical rectangular cavity", *Phys. Fluids* **9**:8(1997), 2339 - 2348.
- [8] Qinlong Ren, Cho Lik Chan, "Numerical study of double-diffusive convection in a vertical cavity with Soret and Dufour effects by lattice Boltzmann method on GPU", *International Journal of Heat and Mass Transfer* **93**(2016), 538–553.
- [9] Pascale Garaud, "Double-Diffusive Convection at Low Prandtl Number", *Annu. Rev. Fluid Mech.* **50**(2018), 275-298.
- [10] Hongtao Xu, Zhuqing Luo, Qin Lou, Shuanyang Zhang, Jun Wang, "Lattice Boltzmann simulations of the double-diffusive natural convection and oscillation characteristics in an enclosure with Soret and Dufour effects", *International Journal of Thermal Sciences.* **136**(2019), 159-171.
- [11] Kosov V.N., Zhakebayev D.B., Fedorenko O.V., "Chislennyy analiz konvektivnykh dvizheniy, vznikayushchikh pri izotermicheskoy diffuzii v vertikal'nykh kanalakh v trekhkomponentnykh gazovykh smesyakh. [Numerical analysis of convective motions arising from isothermal diffusion in vertical channels in three-component gas mixtures]", *News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan - physico-mathematical series* **5**(2017), 134-142 [in Russian].
- [12] Kosov V.N., Fedorenko O.V., Zhakebayev D.B., Kizbayev A.P., "Osobennosti vzniknoveniya strukturirovannykh formirovaniy na granitse smeny rezhimov «diffuziya – kontsentratsionnaya konvektsiya» pri izotermicheskom smeshenii binarnoy smesi v ravnoy stepeni razbavlennoy tret'im komponentom [Features of the emergence of structured formations at the boundary of the change of the "diffusion - concentration convection" modes during isothermal mixing of a binary mixture equally diluted with the third component]", *Teplofizika i aeromekhanika* (2019), 31-40 [in Russian].
- [13] T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, E.M. Viggen, *The Lattice Boltzmann Method* (Switzerland: Springer International Publishing, 2017), 293.
- [14] Bird B.R., Stewart W.E., Lightfoot E.V., *Transport phenomenon* (New York: John Wiley and Sons, Inc., 2002), 914.
- [15] Guo Z., Zheng C., Shi B., "Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method", *Phys. Rev. E.* **65**(2002), 1-6.
- [16] Seta T., "Implicit temperature-correction-based immersed-boundary thermal lattice Boltzmann method for the simulation of natural convection", *Phys. Rev. E.* **87**(2013).