

В. Мукамеденқызы¹ , Б. Ақбердиев^{2*} 

¹Әл Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан

²Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

*e-mail: bekzhanakberdiyev@gmail.com

БИНАРЛЫ ГАЗ ҚОСПАЛАРЫНДАҒЫ МЕХАНИКАЛЫҚ ТЕПЕ-ТЕҢДІК ТҰРАҚТЫЛЫҒЫНА ТЕМПЕРАТУРАНЫҢ ӘСЕРІН САНДЫҚ МОДЕЛЬДЕУ

Бұл жұмыс $Ar-N_2$ жүйесін мысалға ала отырып, гравитациялық өрістегі бинарлы газ қоспаларында температураның механикалық тепе-теңдік тұрақтылығына және массаалмасу сипатына әсерін зерттеуге арналған. Бұл жұмыс екі колбалы аппаратта газдардың изотермдік араласуын қарастырады, онда молекулалық массалары әртүрлі компоненттердің өзара диффузиясы кезінде тығыздықтың тұрақсыз концентрациялық стратификациясының пайда болуы механикалық тепе-теңдіктің бұзылуына әкеледі.

Зерттеудің негізгі мақсаты – әртүрлі қысымдарда диффузия-конвективті массаалмасу режимдерінің қалыптасуы мен дамуында температураның рөлін анықтау. Осы мақсатта компонент тасымалдау теңдеулері мен SST $k-\omega$ турбуленттік моделі қолданылған үшөлшемді кеңістіктегі ANSYS Fluent бағдарламалық пакетінде сандық модельдеу жүргізілді. Температура жүйенің тұрақтылығына өзара диффузия коэффициенттері мен қоспаның массаалмасу қасиеттерінің өзгеруі арқылы әсер ететін сыртқы параметр ретінде қарастырылады.

Бинарлы газ қоспасында механикалық тепе-теңдіктің тұрақтылығына температура шешуші фактор екені анықталды. Температураның көтерілуі компоненттердің диффузиялық қозғалғыштығының артуына байланысты концентрацияға негізделген гравитациялық конвекцияның әлсіреуіне әкеледі, бұл жүйенің тұрақтылық шекарасына жақын жерде тұрақталуында да, дамыған конвекция аймағында конвекциялық тасымалдаудың салыстырмалы тиімділігінің төмендеуінде де көрініс табады. Сандық модельдеу араласу процесінің уақыт бойынша динамикасын қалпына келтіруге және эксперименттік өлшеулерге қолжетімсіз конвективті құрылымдардың эволюциясын анықтауға мүмкіндік берді. Алынған нәтижелер эксперименттік деректермен жақсы сәйкес келеді және бинарлы газ жүйелерінде диффузия-конвекциялық процестерді температуралық бақылау жөніндегі түсінікті кеңейтеді.

Түйін сөздер: бинарлы газ қоспалары, механикалық тепе-теңдік, температуралық әсер, сандық модельдеу.

V. Mukamedenkyzy¹, B. Akberdiyev^{2*}

¹Farabi University, Almaty, Kazakhstan

²Abai Kazakh national pedagogical university, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: bekzhanakberdiyev@gmail.com

Numerical modeling of the effect of temperature on the stability of mechanical equilibrium in binary gas mixtures

This work is devoted to studying the influence of temperature on the stability of mechanical equilibrium and the nature of mass transfer in binary gas mixtures in a gravitational field using the $Ar-N_2$ system as an example. It considers isothermal mixing of gases in a two-flask apparatus, in which the loss of mechanical equilibrium is caused by the formation of unstable concentration stratification of density during the mutual diffusion of components with different molecular weights.

The main objective of the study is to establish the role of temperature in the formation and evolution of diffusion-convective mass transfer regimes at different pressures. To this end, numerical modeling was performed in the ANSYS Fluent software package in a three-dimensional setting using component transport equations and the SST $k-\omega$ turbulent model. Temperature is considered as an external parameter affecting the stability of the system through changes in the mutual diffusion coefficients and transport properties of the mixture.

It has been established that temperature is a determining factor in the stability of mechanical equilibrium in a binary gas mixture. An increase in temperature leads to a weakening of concentration-driven gravitational convection due to an increase in the diffusion mobility of the components, which manifests itself both in the stabilization of the system near the stability boundary and in a decrease in the relative efficiency of convective transport in the region of developed convection. Numerical modeling made it possible to reconstruct the temporal dynamics of the mixing process and reveal the evolution of convective structures that is inaccessible to experimental measurements. The results obtained are in good agreement with experimental data and expand our understanding of the temperature control of diffusion-convective processes in binary gas systems.

Keywords: binary gas mixtures, mechanical equilibrium, temperature effect, numerical modeling.

В. Мукамеденқызы¹, Б. Ақбердиев^{2*}

¹Казахский национальный университет имени аль Фараби, Алматы, Казахстан

²Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан

*e-mail: bekzhanakberdiyev@gmail.com

Численное моделирование влияния температуры на устойчивость механического равновесия в бинарных газовых смесях

Работа посвящена исследованию влияния температуры на устойчивость механического равновесия и характер массопереноса в бинарных газовых смесях в гравитационном поле на примере системы $Ar-N_2$. Рассматривается изотермическое смешение газов в двухколбовом аппарате, при котором потеря механического равновесия обусловлена формированием неустойчивой концентрационной стратификации плотности в процессе взаимной диффузии компонентов с различными молекулярными массами.

Основной целью исследования является установление роли температуры в формировании и эволюции диффузионно-конвективных режимов массопереноса при различных давлениях. Для этого выполнено численное моделирование в программном комплексе ANSYS Fluent в трёхмерной постановке с использованием уравнений переноса компонентов и турбулентной модели SST $k-\omega$. Температура рассматривается как внешний параметр, влияющий на устойчивость системы через изменение коэффициентов взаимной диффузии и транспортных свойств смеси.

Установлено, что температура является определяющим фактором устойчивости механического равновесия в бинарной газовой смеси. Рост температуры приводит к ослаблению концентрационной гравитационной конвекции вследствие увеличения диффузионной подвижности компонентов, что проявляется как в стабилизации системы вблизи границы устойчивости, так и в снижении относительной эффективности конвективного переноса в области развитой конвекции. Численное моделирование позволило восстановить временную динамику процесса смешения и выявить эволюцию конвективных структур, недоступную при экспериментальных измерениях. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными и расширяют представления о температурном контроле диффузионно-конвективных процессов в бинарных газовых системах.

Ключевые слова: бинарные газовые смеси, механическое равновесие, температурный эффект, численное моделирование.

Кіріспе

Бинарлы газ қоспаларын зерттеу – қазіргі заманғы теориялық және қолданбалы гидродинамиканың негізгі міндеттерінің бірі, себебі мұндай жүйелердегі массаалмасу механизмдері қабатталған ортаның динамикалық қасиеттерін анықтап, физикалық және технологиялық процестердің кең ауқымына түбегейлі әсер етеді. Бинарлы газ қоспаларындағы массаалмасу процестерін тереңірек түсіну аэродинамика, астрофизика және климатология үшін, сондай-ақ химиялық және энергетикалық технологиялар саласындағы мәселелер үшін де негізгі маңызы бар [1–6].

Температура градиенті болмаса да, гравитациялық өрісте молекулалық массалары әртүрлі газдардың изотермдік өзара диффузиясы концентрацияға негізделген тығыздық стратификациясының пайда болуына әкелуі мүмкін [7–8]. Мұндай стратификация жүйеде механикалық тепе-теңдік бұзылып, диффузиялық режимінен концентрациялық гравитациялық конвекция режимге өту байқалады. Кинетикалық араласу режимдерінің өзгеруі тығыздық градиентінің пайда болуымен анықталады, ол температуралық біртектіліктің бұзылуынан да, қоспа компоненттерінің диффузиялық қасиеттеріндегі айырмашылықтардан да туындауы мүмкін [9–12].

Бинарлы газ жүйелерінде күрделі конвекциялық режимдердің қалыптасуы концентрация мен термодиффузия өрістерінің біркелкі еместігімен байланысты, бұл массаалмасудың бәсекелес механизмдерін тудырады. Тұрақсыздықтың дамуында компоненттердің өзара диффузия коэффициенттерінің айырмашылығы маңызды рөл атқарады, ол концентрация градиентінің кеңістік-уақыттық эволюциясының сипатын анықтайды. Изотермдік емес жағдайлардағы тұрақсыз диффузиялық процестерді талдау күрделірек мәселе болып табылады, себебі температура факторы екі түрлі жолмен көрініс табуы мүмкін: бір жағынан, температура градиенті тұрақсыздықтың дамуын жеделдететін катализатор ретінде әрекет ете алады, ал екінші жағынан, температураның

көтерілуі тасымалдау коэффициенттерінің өзгеруіне байланысты жүйені тұрақтандыруға әкелуі мүмкін [1, 8, 13–15]. Осы тұрғыдан алғанда, компоненттердің диффузиялық қозғалғыштығының рөлі изотермдік араласу жағдайларында айқын көрінеді, бұл осындай режимдерді концентрацияға негізделген гравитациялық конвекция механизмдерін талдауға ерекше қолайлы етеді.

Кең ауқымды тәжірибелік зерттеулердің қолжетімділігіне қарамастан, бинарлы газ қоспаларындағы механикалық тепе-теңдіктің тұрақтылығына температураның әсерін сандық сипаттау, әсіресе тәжірибелік деректерді сандық модельдеу нәтижелерімен салыстыру тұрғысынан алғанда әлі де шектеулі [16, 17]. Қазіргі есептеу әдістері ағын құрылымдары мен концентрациялық өрістерді егжей-тегжейлі талдауға мүмкіндік береді, бірақ олар сенімді эксперименттік деректерге негізделген мұқият тексеруді қажет етеді [12].

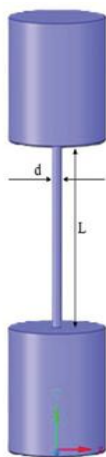
Зерттеудің мақсаты – конвективті ағынның дамуы жағдайында бинарлы газ қоспаларындағы концентрация өрістерінің құрылымын талдау және жүйенің механикалық тепе-теңдік шекараларының параметрлік тәуелділігін ескеретін сандық массаалмасу моделін әзірлеу және оны тексеру. Жұмыста массаалмасудың диффузиялық режимінен концентрациялық гравитациялық конвекция режиміне өтуін сипаттайтын өлшемсіз параметрлердің критикалық мәндерін анықтауға ерекше назар аударылады. Механикалық тепе-теңдіктің тұрақтылығы гидродинамикалық тұрақтылық теориясы шеңберінде сандық модельдеу әдістері арқылы зерттеледі. ANSYS Fluent бағдарламалық пакетінің [16–19] есептеу мүмкіндіктері концентрация градиенттерінің кеңістік-уақыттық динамикасы мен тұрақтылық шекараларын талдау үшін пайдаланылды. Жұмыста бинарлы аргон–азот газ қоспасы үшін массаалмасу режимінің өзгерісінің критикалық шекарасын тәжірибелік және сандық анықтау жүргізілді және есептелген нәтижелер тәжірибелік мәліметтермен жақсы сәйкестігін көрсетті.

Есептің қойылымы және сандық әдістер

Зерттеу нысаны ретінде [20]-да келтірілген, қысымы 4.02 МПа және температура аралығы $297\text{--}353 \text{ К}$ жағдайларында жүргізілген тәжірибелік зерттеулердің нәтижелері алынды. Бұл зерттеулер екі колбалы әдісті жүзеге асыратын эксперименттік қондырғыны

пайдалану арқылы орындалған, оның сұлбасы 1-суретте көрсетілген. Диффузиялық аппарат көлемдері бірдей екі колбадан ($V_u = V_l = 69.5 \text{ см}^3$) тұрады, олар диаметрі $d = 3.4 \text{ мм}$ және ұзындығы $L = 70 \text{ мм}$ болатын диффузиялық арна арқылы өзара байланысқан. Эксперименттердің ұзақтығы

17 минутты құрады. ANSYS Fluent бағдарламалық кешені еркін геометриялық диффузиялық арналарды үшөлшемді модельдеуге мүмкіндік береді [20], сондай-ақ таңдалған тендеулер жүйесімен сипатталатын физикалық процестерді көрнекі түрде визуализациялауды қамтамасыз етеді.



1-сурет. Диффузиялық ұяшықтың және есептік модельдеу аймағының үшөлшемді моделі

Бинарлы газ қоспасын модельдеу кезінде есептеу аймағын дискреттеу үшін аралас тор әдісі қолданылды. Жүйенің цилиндрлік элементтері үшбұрыштық шектеулі элементтерге негізделген құрылымсыз тор арқылы жуықталып, диффузиялық арна төртбұрыштық элементтерден құралған құрылымды тор арқылы модельденді. Бұл тор құру стратегиясы қондырғының әртүрлі бөліктерінің геометриялық ерекшеліктерін тиісті түрде ескеруге мүмкіндік береді. 1 мм сипаттамалық тор ұяшығы өлшемін таңдау модель геометриясын дәл қайталауды және сандық шешімнің тұрақты сәйкестігін қамтамасыз етеді [21]. Шамамен 425000 элементтен тұратын есептеу аймағының жалпы рұқсат ету қабілеті бинарлы газ жүйесіндегі массаалмасу және араласу процестерін сенімді сипаттауға жеткілікті. Үшбұрышты және төртбұрышты элементтерді біріктіретін гибриді тор модельдеу дәлдігі мен есептеу тиімділігі арасындағы оңтайлы тепе-теңдікті қамтамасыз етеді. Цилиндрлік аймақтарда үшбұрышты ұяшықтарды қолдану қисық беттерді дұрыс жуықтап көрсетуге мүмкіндік береді, ал диффузиялық арнадағы құрылымдық тор есептеу шығындарын айтарлықтай азайтады. Ұсынылған тәсіл бинарлы газ қоспаларындағы процестерді сандық модельдеу үшін есептеу торын құрудың қазіргі заманғы тәжірибелеріне сәйкес келеді, онда элемент түрлері мен өлшемдерін таңдау

аймақтың геометриялық күрделілігі мен есептеу дәлдігіне қойылатын талаптар арасындағы тепе-теңдік негізінде анықталады [22].

$Ar-N_2$ жүйесіндегі массаалмасуын моделдеу алғашқы тәжірибелік шарттарды ескеріліп жүргізілді: онда аргон жоғарғы колбада, ал азот төменгі колбада орналасқан [20]. Газдардың молекулалық массаларының айырмашылығынан туындайтын бұл конфигурация қоспа тығыздығының айқын гравитациялық стратификациясын қалыптастырады және механикалық тепе-теңдіктің бұзылуымен байланысты процестерді зерттеуге мүмкіндік береді. Математикалық модельдеу шеңберінде газ тәрізді ортаның физика-химиялық сипаттамалары тұрақты деп қабылданды. Тиісті параметрлердің сандық мәндері ANSYS Fluent бағдарламалық пакетіне енген дерекқорынан алынды.

Аппарат жабық жүйе ретінде модельделгендіктен, оның барлық шекарасында өткізбейтіндік (no-flux) шарттары белгіленеді. Мұндай шекаралық шарт математикалық тұрғыдан басқару бетіндегі кез келген массаалмасуды болдырмайды, осылайша жүйені материалдық құрамдастары бойынша сыртқы ортадан оқшаулайды. Араластыру процесінің изотермді болуын қамтамасыз ету үшін тиісті жылу шекаралық шарттары қолданылды, ал аппараттың корпусы құрылымдық тот баспайтын болаттан жасалған қатты қабырға ретінде модельденді, оның термодинамикалық және беріктік қасиеттері де стандартты ANSYS Fluent материалдар кітапханасынан [21–23] алынды.

Механикалық тұрақсыздықтан туындайтын конвективті ағындар бастапқы кезеңде күрделі эволюциялық динамиканы көрсетеді. Конвективті ағымдардың эволюциясы бірнеше кезеңнен тұрады: шағын конвективті бұзылыстардың сызықты өсуі, тұрақсыздық режимдерінің сызықты емес өзара әрекеттесуі, көпмасштабты вихрлік құрылымдардың қалыптасуымен турбулентті режимге өту және жүйе параметрлерімен анықталатын басқа да ерекшеліктер [20]. Әртүрлі қарқынды конвективті ағымдары бар ортада бөлшектеме ағындарды талдау үшін $k-\omega$ турбуленттік моделін [22–24] қолдану орынды, ол массаалмасу процестерін кең ауқымда жеткілікті дәл сипаттауға мүмкіндік береді. Бастапқы және шекаралық шарттар келесідей қойылды: бастапқы уақытта диффузия аппаратының жоғарғы және төменгі колбаларда әртүрлі қос газ қоспалары болды. Компоненттердің молярлық үлестері тиісті торлық аймақтарға “патч” әдісі арқылы анықталды.

ANSYS Fluent бағдарламасында бинарлы газ қоспаларын модельдеу компоненттерге (массалық үлестер Y_1 және Y_2) арналған тасымалдау және қозғалыс теңдеулері арқылы жүзеге асырылады. Массаалмасу молекулалық және турбулентті диффузияны ескере отырып конвекция-диффузия теңдеулерімен сипатталады, ал қоспаның тығыздығы таңдалған күй теңдеуі бойынша есептеледі. Формулаларға массалық үлес үшін тасымалдау теңдеуі кіреді [21]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho Y_1)}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{u} Y_1) &= \nabla(\rho D_{eff} \nabla Y_1) + S_1, \\ \frac{\partial(\rho Y_2)}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{u} Y_2) &= \nabla(\rho D_{eff} \nabla Y_2) + S_2, \end{aligned} \quad (1)$$

мұндағы D_{eff} – эффективті диффузия, S_1 , S_2 – компоненттердің мүмкін болатын массалық көздері мен жұтылуын ескеретін жалпыланған мүшелер. Қарастырылып отырған есепте қосымша масса көздері жоқ.

Стандартты $k-\omega$ моделі жартылай эмпирикалық тасымалдау теңдеулері жүйесіне негізделген, оған турбулентті кинетикалық энергия k және спецификалық диссипациялық жылдамдық ω теңдеулері кіреді, мұнда ω турбулентті энергияның диссипациялық жылдамдығы ε -нің k -ға қатынасы ретінде анықталады [21].

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \vec{u} k) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k - Y_k + S_k + G_k, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \vec{u} \omega) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + G_\omega - Y_\omega + S_\omega + G_\omega, \end{aligned}$$

мұндағы G_k – орташа жылдамдықтың градиентінен туындайтын турбуленттілік нәтижесінде пайда болатын кинетикалық энергияның түзілуін сипаттайды; ρ – орта тығыздығы; $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$ – жылдамдық векторы; G_ω – меншікті диссипация жылдамдығының ω генерациясын сипаттайды. Берілген теңдеулер жүйесінде Γ_k және Γ_ω , сәйкесінше, k және ω үшін тиімді турбулентті диффузияны сипаттайды; Y_k және Y_ω – диссипация мүшелері; S_k мен S_ω – пайдаланушы анықтайтын бастапқы шарттар, осы жұмыста олар нөлге тең деп есептеледі [17]. i және j индекстері координаттар бойынша қосындыны білдіреді ($i, j = 1, 2, 3$).

$k-\omega$ моделі үшін эффективті диффузиялық коэффициенттер келесі теңдеулермен беріледі:

$$\begin{aligned} \Gamma_k &= \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}, \\ \Gamma_\omega &= \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega}. \end{aligned} \quad (3)$$

Прандтль турбуленттік сандары σ_k мен σ_ω диффузиялық жолмен тасымалданатын турбулентті кинетикалық энергияның тиімділігін және оның диссипация жылдамдығын анықтайды. Қолданылған модельде $\sigma_k = \sigma_\omega = 2$ тұрақты мәндер қабылданған. Молекулалық тұтқырлық μ турбулентті кинетикалық энергия k және диссипация жылдамдығының ω функциясы болып табылатын турбулентті тұтқырлықпен μ_t толықтырылады:

$$\mu_t = \alpha^* \frac{\rho k}{\omega}, \quad (4)$$

мұндағы α^* – турбуленттік тұтқырлықты бәсеңдететін және тұрақты $\alpha^*=1$ мәнге ие коэффициент [21].

1 және 2 заттар үшін \vec{J}_1 және \vec{J}_2 диффузиялық ағындар келесі формулалар бойынша анықталады:

$$\begin{aligned} \vec{J}_1 &= - \left(\rho D_{12} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_1 \\ \vec{J}_2 &= - \left(\rho D_{12} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_2 \end{aligned} \quad (5)$$

Ұсынылған модельде: μ_t – турбулентті тұтқырлық; $Sc_t = \mu_t / (\rho D_t)$ – Шмидт турбуленттік саны, Sc_t -тің стандартты мәні 0.7 деп алынады. D_{12} – өзара диффузия коэффициенті; T – температура.

Өзара диффузия коэффициенті D_{12} Чэпмен–Энског кинетикалық теориясы [21] бойынша келесі формула бойынша анықталады:

$$D_{12} = 0.00186 \frac{\left[T^3 \left(\frac{1}{M_{w,1}} + \frac{1}{M_{w,2}} \right) \right]^{\frac{1}{2}}}{p_{abs} \sigma_{12}^2 \Omega_D}, \quad (6)$$

мұндағы M_w – мольдік масса (г/моль), T – температура (K), p_{abs} – абсолюттік қысым (атм), Ω_D – өлшемсіз соқтығысу диффузиялық интегралы, жүйедегі молекулалық өзара әрекеттестіктің интенсивтілігін сандық тұрғыда сипаттайды.

Барлық есептеу модельдері үшін қысым әдісіне негізделген тәсіл қолданылды. Есептеу сұйықтық динамикасы теңдеулерін кеңістік бойынша дискреттеу үшін 1-кестеде көрсетілген

схемалар пайдаланылды, олар [16, 18] еңбектерінде сынақтан өткізіліп, расталған.

1-кесте. Шешу тәсілдері

Шама	Дискреттеу
Gradient	Least Square Cell Based
Pressure	PRESTO!
Momentum	Second Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy	Second Order Upwind
Specific Dissipation Rate	Second Order Upwind
Pseudo Time Method	Off
Transient Formulation	Second Order Implicit

Берілген параметрлер ANSYS Fluent ортасындағы сандық шешімнің конфигурациясын сипаттайды, басқару теңдеулеріне қолданылған дискретизация әдістерін, шамалау схемаларын және модельдеу процесінде пайдаланылатын есептеу алгоритмдерін егжей-тегжейлі көрсетеді. Таңдалған, жақсы дәлелденген дискретизация схемаларының комбинациясы сандық шешімнің дәлдігі мен есептеу тиімділігі арасындағы оңтайлы тепе-теңдікті қамтамасыз етеді, бұл конвективті және диффузиялық процестердің біріктірілген әсері бар мәселелер үшін аса маңызды және осы кластың мәселелері үшін артықшылыққа ие таңдау болып табылады [21, 25].

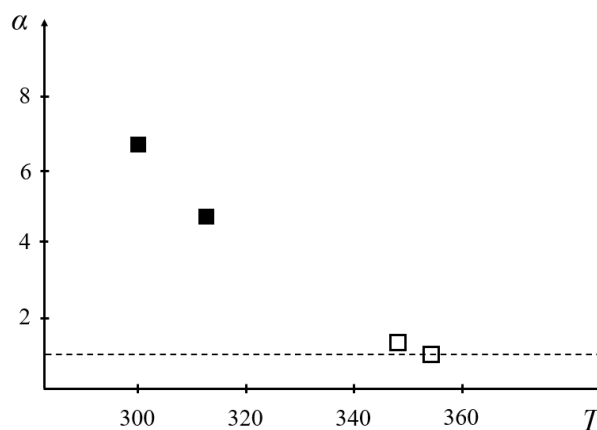
Сандық зерттеулердің нәтижелері және талқылау

Бинарлы газ қоспаларының динамикасын сандық модельдеу Ansys Fluent 2025 R2 бағдарламалық ортасында Intel Core i5-12450HX процессорымен, 16 Гб жедел жады және NVIDIA GeForce RTX 3050 графикалық үдеткішімен жабдықталған Lenovo LOQ 15IAX9 есептеу жүйесінде жүргізілді. Есептеу сценарийінің күрделілігі мен итерациялық конвергенция сипаттамаларына байланысты бір есептеу тәжірибесінің ұзақтығы 120 минуттан 180 минутқа дейін созылды.

2-сурет $Ar-N_2$ бинарлы газ жүйесінде температураға тәуелді α параметрінің $p = 0,584$ МПа тұрақты қысым мен $\tau = 17$ мин араластыру уақытындағы мәнін көрсетеді. α параметрі эксперименттік түрде алынған компоненттің молярлық үлесін Стефан–Максвелл теңдеулеріне негізделген таза диффузиялық массаалмасу болжамы бойынша есептелген сәйкес мәнге қатынасы ретінде анықталады. Осылайша, α – нақты массаалмасу процесінің диффузия режимінен ауытқуын сандық тұрғыда бағалауға мүмкіндік беретін интегралдық сипаттама.

Температура көтерілген сайын α параметрінің мәндері монотонды түрде азайып, бірге жақындайды, бұл тұрақты диффузия режиміне сәйкес келеді. $\alpha \leq 1$ аймағында эксперименттік деректер диффузиялық жуықтама бойынша есептеулермен жақсы сәйкес келеді, ал конвекциялық әсерлер болмайды немесе бәсеңдетілген сипатта болады. Бұл құбылыс өзара диффузия коэффициентінің артуымен және тығыздықтың стратификациясының рөлінің бір мезгілде азаюымен байланысты және бұл жүйенің механикалық тепе-теңдігін тұрақтандырады. Алынған α параметрінің температураға тәуелділігі берілген термобаралық жағдайларда

$Ar-N_2$ жүйесінде концентрацияға негізделген гравитациялық конвекциядан диффузия режиміне өту шекарасын анықтауға мүмкіндік береді.



2-сурет. $p = 0,584$ МПа, $\tau = 17$ мин кезіндегі $Ar - N_2$ жүйесі үшін α параметрінің температураға тәуелділігі: ■, □ - эксперименттік деректер [20]; нүктелі сызық – диффузия болжамына негізделген есептеу

Суреттен көрініп тұрғандай, $\alpha > 1$ мәндері салыстырмалы түрде төмен температураларда байқалады, бұл эксперименттік массаалмасу диффузиялық есептеуден асатынын көрсетеді. Бұл жүйеде механикалық тепе-теңдіктің бұзылуын және концентрациялық гравитациялық конвекцияның дамуын көрсетеді, онда конвекциялық ағындардың пайда болуы массаалмасуын күшейтеді. Осы температуралық ауқымда молекулалық диффузия пайда болған тығыздық ауытқуларын басуға жеткіліксіз болып, конвекциялық механизмнің үлесі басым болады.

2-кестеде концентрациялардың тәжірибелік, теориялық (Стефан–Максвелл теңдеулері бойынша) және сандық есептік (ANSYS Fluent бағдарламасындағы) мәндері келтірілген. Кестеде көрсетілгендей, $p = 4,02$ МПа қысым кезінде Ar–N₂ жүйесі үшін төменгі колбаға диффузияланған аргон мөлшері 297–353 К температура аралығында температураның артуымен монотонды түрде өседі. Сонымен қатар, Стефан–Максвелл теңдеулері бойынша алынған есептік мәндер байқалатын массалық тасымалды айтарлықтай төмен бағалайды, ал ANSYS Fluent бағдарламасында жүргізілген модельдеу нәтижелері бүкіл температура диапазонында тәжірибелік деректермен жақсы сәйкес келеді. Бұл жоғары қысым жағдайында жүйе концентрациялық гравитациялық конвекция аймағында терең орналасқан кезде массалық тасымалдаудың конвективтік механизмінің тұрақты түрде басым болатынын көрсетеді.

Алғаш қарағанда мұндай көрініс 2-суретте көрсетілген нәтижелерден өзгеше болып көрінеді, мұнда салыстырмалы түрде төмен қысымда ($p = 0,584$ МПа) температураның артуымен тәжірибелік мольдік үлестер, сонымен қатар α параметрі азайып, диффузиялық шекке ұмтылады. Алайда, 2-сурет пен 2-кесте қысым бойынша әртүрлі аймақтарға сәйкес келетінін және тиісінше жүйенің «диффузия–конвекция» шекарасына қатысты әртүрлі күйде орналасқанын атап өткен жөн. $p = 0,584$ МПа кезінде жүйе критикалық аймаққа жақын орналасады: температураның артуы өзара диффузия коэффициентін арттырып, сонымен қатар тиімді Рэлей санын төмендетеді. Бұл механикалық тепе-теңдіктің тұрақтануына және конвекция үлесінің азаюына алып келеді - нәтижесінде α параметрі бірге ұмтылады.

2-кесте. $p = 4.02$ МПа және $\tau = 17$ мин кезінде Ar–N₂ жүйесі үшін төменгі колбаға диффузияланған Ar мөлшері

Температура, К	Компоненттердің концентрациялары, мольдік үлестер		
	Эксперимент [20]	Стефан–Максвелл бойынша есептелген	Ansys Fluent
297	0.1403	0.0018	0.1349
313	0.1482	0.0020	0.1498
343	0.1534	0.0023	0.1614
353	0.1698	0.0024	0.1719

$p = 4,02$ МПа кезінде жағдай өзгеше: жүйе конвективтік аймақтың терең бөлігінде орналасқан және қарастырылып отырған

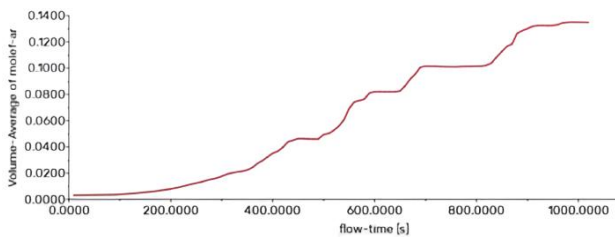
температура диапазонының барлығында режим конвективтік күйде сақталады. Бұл жағдайда температураның артуы заттың жалпы тасымалының біршама өсуіне алып келеді (2-кесте), алайда α параметрін қайта есептегенде оның мәндері температура өскен сайын төмендейді, яғни конвективтік тасымалдың диффузиялық тасымалдан салыстырмалы артықшылығы әлсірейді. Осылайша, 2-кесте мен 2-сурет қарама-қайшы емес, керісінше, бірін-бірі толықтыратын құбылыстарды сипаттайды: төмен қысымдарда температураның артуы жүйені диффузия басым режимге ауыстырса, ал жоғары қысымдарда конвективтік режим сақталады, бірақ температураның өсуіне қарай оның тиімділігі біртіндеп төмендейді.

Эксперименттік тәсілге қарағанда сандық модельдеу массаалмасу процесінің толық уақыттық эволюциясын қалпына келтіруге мүмкіндік береді, өйткені экспериментте тек соңғы уақыттағы концентрацияның интегралдық мәні ғана өлшенеді. Бұл тәсіл бастапқы кезеңді, өтпелі режимдерді және квази-тұрақты араласу құрылымының қалыптасуын қамтиды, соның нәтижесінде механикалық тепе-теңдіктің тұрақсыздық механизмдерін тереңірек талдауға жағдай жасалады.

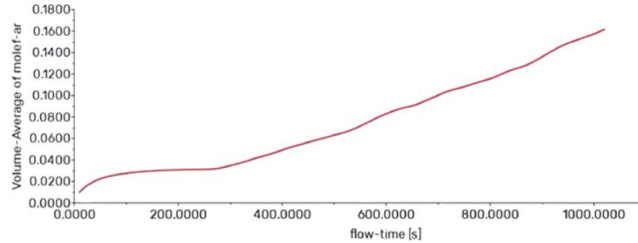
3a-суреттен көрінгендей, $T = 297$ К температурада аргон концентрациясының уақыттық тәуелділігі айқын бейстационарлықпен сипатталады, ол массатасымалдың үдеуі мен баяулауы кезектесіп отыратын аймақтардың пайда болуымен көрінеді. Мұндай көрініс диффузиялық арнада конвективтік құрылымдардың біртіндеп пайда болуы, дамуы және ішінара ыдырауы нәтижесінде туындайды, бұл концентрациялық гравитациялық конвекция аясында зат тасымалының импульстік күшеюіне әкеледі. Температураның $T = 313$ және 343 К-ге дейін артуымен (3b, 3c-суреттер) уақыттық тәуелділіктер біршама тегістелген әрі тұрақты сипатқа ие болады және флуктуация амплитудасы азайған орнықты конвективтік режимнің қалыптасуын көрсетеді. Температураның өсуі өзара диффузия коэффициентінің артуымен қатар тығыздық стратификациясының салыстырмалы үлесінің төмендеуімен қатар жүреді, соның нәтижесінде конвективтік ағындар импульстік сипатын жоғалтып, уақыт бойынша анағұрлым реттелген күйге өтеді. $T = 353$ К температурада (3d-сурет) қысық монотонды болып, уақыттың біркелкі функциясына жақындайды. Бұл массатасымалының квазистационарлық сипатын және жүйенің механикалық тепе-теңдігінің одан әрі тұрақтануын көрсетеді. Берілген қысымда конвективтік механизм сақталғанымен, оның

кеңістіктік-уақыттық құрылымы анағұрлым реттелген сипатқа ие болады, ал молекулалық диффузияның жалпы тасымалдағы үлесі артып,

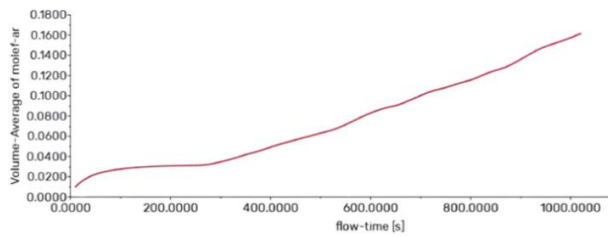
айқын бейстационарлық эффекттердің бәсеңдеуіне алып келеді.



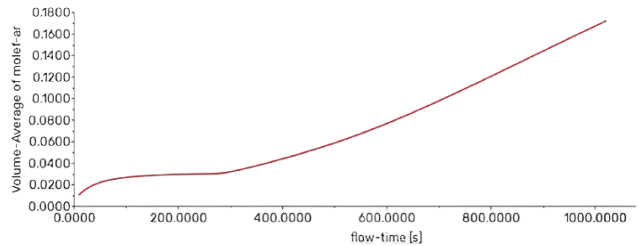
а)



ә)



б)



в)

3-сурет. $p=4.02$ МПа және $t=17$ мин кезінде Ar-N₂ жүйесі үшін төменгі колбадағы Ar концентрациясы өзгерісінің уақытқа тәуелділігі: а) $T=297$ К; ә) $T=313$ К; б) $T=343$ К; в) $T=353$ К.

Қорытынды

Бұл жұмыста гравитациялық өрісте изотермдік араластыру жағдайында бинарлы Ar-N₂ газ қоспасында температураның механикалық тепе-теңдік тұрақтылығына және массаалмасу сипатына әсерін эксперименттік және сандық әдістер арқылы зерттеу жүргізілді. Температура диффузия-конвекциялық режимдердің қалыптасуында шешуші рөл атқаратыны және қоспаның тасымалдау қасиеттерін өзгерте отырып диффузиялық және концентрацияға негізделген гравитациялық конвекция арақатынасын басқаратыны көрсетілді.

Температураның көтерілуі концентрациялық гравитациялық конвекцияның әлсіреуіне әкелетіні анықталды, бұл тұрақтылық шекарасына жақын жердегі механикалық тепе-теңдіктің тұрақталуында да, дамыған конвекция аймағындағы конвекциялық массаалмасудың салыстырмалы тиімділігінің төмендеуінде де көрініс табады.

ANSYS Fluent бағдарламалық пакетінде үшөлшемді конфигурацияда массаалмасу теңдеулері мен SST $k-\omega$ турбуленттік моделі

қолданылып жүргізілген сандық симуляциялар интегралдық массаалмасу сипаттамалары бойынша эксперименттік нәтижелермен жақсы сәйкестігін көрсетті. Сандық әдістің басты артықшылығы – араласу процесінің толық уақыттық дамуын, соның ішінде тұрақсыздықтың бастапқы кезеңі мен кейінгі квази-тұрақты конвективті құрылымдардың қалыптасуын қалпына келтіру мүмкіндігі. Бұл концентрация мәндерімен шектелген эксперименттік өлшеулер шеңберінде қол жеткізу мүмкін емес.

Алынған нәтижелер температураның бинарлы газ қоспаларындағы механикалық тепе-теңдік тұрақтылығына әсер етуінің физикалық механизмдерін анықтап, концентрациялық гравитациялық конвекцияның табиғаты түсінігін кеңейтеді. Ұсынылған тәсіл мен анықталған заңдылықтар тығыздығы қабаттасқан газ жүйелеріндегі массаалмасуды модельдеуде қолданылуы мүмкін және үшкомпонентті және көпкомпонентті газ қоспаларын одан әрі зерттеудің негізін құрайды.

Авторлардың үлесі

В. Мукамеденқызы: әдістеме әзірлеу, зерттеу жүргізу, мәтінді редакциялау және толықтыру, ғылыми жетекшілік, жобаны басқару, тұжырымдама жасау, жарияланған жұмысты дайындау; **Б. Ақбердиев:** бағдарламалық код пен қолдаушы алгоритмдерді іске асыру; компьютерлік бағдарламаларды жобалау, формалды талдау, әдістемені әзірлеу, деректерді өңдеу және басқару, қолжазбаның бастапқы нұсқасын дайындау және жазу.

Әдебиеттер

1. V. Kossov, H. Altenbach, Diffusion mechanisms of convective instability in liquid and gas mixtures, *Z Angew Math Mech.* **103**, e202300801 (2023). <https://doi.org/10.1002/zamm.202300801>
2. D. Livescu, J.R. Ristorcelli, M.R. Petersen and R.A. Gore, New phenomena in variable-density Rayleigh–Taylor turbulence, *Physica Scripta* **2010**(142), 014015 (2010). <https://doi.org/10.1088/0031-8949/2010/T142/014015>
3. A. Mialdun, H. Bataller, M. M. Bou-Ali, M. Braibanti, F. Croccolo, A. Errarte, J. M. Ezquerro, J. J. Fernández, Yu. Gaponenko, L. García-Fernández, J. Rodríguez & V. Shevtsova, Preliminary analysis of Diffusion Coefficient Measurements in ternary mIXtures 4 (DCMIX4) experiment on board the International Space Station, *The European Physical Journal E.* **42**, 87 (2019). <https://doi.org/10.1140/epje/i2019-11851-6>
4. Y. Gaponenko, A. Mialdun & V. Shevtsova, Experimental and numerical analysis of mass transfer in a binary mixture with Soret effect in the presence of weak convection, *The European Physical Journal E.* **37**, 90 (2014). <https://doi.org/10.1140/epje/i2014-14090-5>
5. O. Fedorenko & I. Poyarkov, Instability of mechanical equilibrium in non-ideal gas mixtures. *Recent Contributions to Physics* **2024**(3), 116–124 (2024). <https://doi.org/10.26577/RCPH.2024v90i3-014>
6. V. Kossov, O. Fedorenko, D. Zhakebayev, V. Mukamedenkyzy and D. Kulzhanov, Convective mass transfer of a binary gas mixture in an inclined channel. *Z Angew Math Mech.* **102**, e201900197 (2022). <https://doi.org/10.1002/zamm.201900197>
7. A. Vailati, S. Xu and S. Aime, Diffusion and convection in nature, *European Physical Journal E.* **44**, 145 (2021). <https://doi.org/10.1140/epje/s10189-021-00148-0>
8. N.B. Ankusheva, V.N. Kossov & V.D. Seleznev, Effect of diffusion channel inclination on stability of mechanical equilibrium in isothermal binary gas mixtures, *J Appl Mech Tech Phy.* **51**, 62–64 (2010). <https://doi.org/10.1007/s10808-010-0009-y>
9. G. Ahlers, S. Grossmann & D. Lohse, Heat transfer and large scale dynamics in turbulent Rayleigh–Bénard convection, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 503 (2009). <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.503>
10. R. Liyanage, Direct comparison of density-driven convective mixing in a three-dimensional porous medium, *Physical Review Fluids* **9**, 043802 (2024). <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.9.043802>
11. A. Banerjee, Rayleigh-Taylor Instability: A Status Review of Experimental Designs and Measurement Diagnostics, *Journal of Fluids Engineering* **142**(12), 12-29 (2020). <https://doi.org/10.1115/1.4048349>
12. V.N. Kossov, S.A. Krasikov, S.M. Belov, O.V. Fedorenko, M. Zhaneli, Comparative study of evolution of structured flows at boundary of the regime change “diffusion — concentration convection” in isothermal multicomponent mixing in gases by techniques of visual and numerical analysis, *Bulletin of the Karaganda University “Physics” series*, **109**(1), 49-58 (2023). <https://doi.org/10.31489/2023ph1/49-58>
13. V. Kosov, O.V. Fedorenko, M.K. Asembaeva, V. Mukamedenkyzy, Changing diffusion-convection modes in ternary mixtures with a diluent gas, *Theor. Found. Chem. Engin.* **54**(2), 289-296 (2020). <https://doi.org/10.1134/S0040579520020086>
14. T. Qiu, C. Li, Y. Zhang, W. Ge, HS-PPM simulation for diffusion coefficients of binary and multicomponent gas mixtures, *AIChE Journal*, **71**(9), e18891 (2025). <https://doi.org/10.1002/aic.18891>
15. V.V. Dil'man, V.A.Lotkhov, Molecular turbulent evaporation in a gravitational field, *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, **49**(1), 102–106 (2015). <https://doi.org/10.1134/S0040579515010017>
16. V.N. Kossov, V. Mukamedenkyzy, A. Tolepbergen and H. Altenbach, Peculiarities of combined mixing caused by instability of mechanical equilibrium of isothermal ternary gas mixture at diffusion, *International Journal of Chemical Engineering* **1**, 9643371 (2025). <https://doi.org/10.1155/ijce/9643371>
17. T. Qiu, C. Li, Y. Zhang and W. Ge, HS-PPM simulation for diffusion coefficients of binary and multicomponent gas mixtures, *AIChE Journal* **71**(9), e18891 (2025). <https://doi.org/10.1002/aic.18891>
18. V. Mukamedenkyzy, A.G. Tolepbergen, Some features of rayleigh-taylor convection in the mixing of ideal gas mixtures, *Recent Contributions to Physics* **92**(1), 110-119 (2025). <https://doi.org/10.26577/RCPH202592112>
19. D.B. Zhakebayev, O.V. Fedorenko, V.N. Kossov, V. Mukamedenkyzy and O.L. Karuna, Simulation of concentration convection in an inclined channel, *Heat Transfer Research* **53**(15), 39-52 (2022). <https://doi.org/10.1615/HeatTransRes.2022043133>
20. Д.У. Кулжанов, Устойчивость механического равновесия в бинарных газовых смесях при различных температурах, *Recent Contributions to Physics Сер. физ.* **2**, 115-118 (2002).
21. User’s ANSYS Fluent Guide, Release 2025. ANSYS Inc., Canonsburg, PA, USA. <https://www.ansys.com/>
22. H. Kutkan, J. Guerrero, Turbulent premixed flame modeling using the algebraic flame surface wrinkling model: a comparative study between OpenFOAM and ANSYS Fluent, *Fluids* **6**, 462 (2021). <https://doi.org/10.3390/fluids6120462>
23. N. Slavinskaya & O. Haidn, Direct numerical simulation of spray and dispersion of liquid fuel droplets, *Recent Contributions to Physics* **2023**(1), 72–80 (2023). <https://doi.org/10.26577/RCPH.2023.v84.i1.09>
24. O. Nouhaila, M. Hassane, M.L. Scutaru and L. Jelenschi, On the accuracy of turbulence model simulations of the exhaust manifold, *Applied Sciences* **14**, 5262 (2024). <https://doi.org/10.3390/app14125262>

25. M. A. Abd Halim, N. A. R. Nik Mohd, M. N. Mohd Nasir and M. N. Dahalan, The Evaluation of k- ϵ and k- ω Turbulence Models in Modelling Flows and Performance of S-shaped Diffuser, *International Journal of Automotive and Mechanical Engineering* **15**, 5171-5177 (2018). <https://doi.org/10.15282/ijame.15.2.2018.2.0399>

Авторлар туралы мәлімет:

Венера Мукамеденқызы – физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор. Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, (Алматы, Қазақстан, e-mail: mukameden@inbox.ru).

Бекжан Акбердиев (автор-корреспондент) – PhD студенті, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, (Алматы, Қазақстан, e-mail: bekzhanakberdiyev@gmail.com).

Information about authors:

Venera Mukamedenkazy – PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor, Al-Farabi Kazakh National University, (Almaty, Kazakhstan), e-mail: mukameden@inbox.ru.

Bekzhan Akberdiyev (corresponding author) – PhD student, Abai Kazakh National Pedagogical University, (Almaty, Kazakhstan, e-mail: bekzhanakberdiyev@gmail.com).

Сведения об авторах:

Венера Мукамеденқызы – кандидат физико-математических наук, ассоциированный профессор, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, (Алматы, Казахстан, e-mail: mukameden@inbox.ru).

Бекжан Акбердиев (автор-корреспондент) – PhD студент, Казахский национальный педагогический университет им. Абая, (Алматы, Казахстан, e-mail: bekzhanakberdiyev@gmail.com).

Мақала тарихы: түсті: 22 ақпан 2026; түзетілді: 14 сәуір; қабылданды: 21 мамыр 2026.

Article history: received: 22 February 2026; revised: 14 April; accepted: 21 May 2026.

История статьи: поступила: 22 февраля 2026; после доработки 14 апреля; принята: 21 мая 2026.