ВЛИЯНИЕ ПЕРЕМЕННОГО КОЭФФИЦИЕНТА ТЕРМОДИФФУЗИИ НА КОНВЕКЦИЮ БИНАРНОЙ СМЕСИ В ПРЯМОУГОЛЬНЫХ ПОЛОСТЯХ

Т.П. Любимова^{1,2}, К.С. Рушинская¹, Н.А. Зубова¹

¹Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, Российская Федерация ²Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Российская Федерация

Представлены результаты численного моделирования нелинейных режимов конвекции водного раствора поваренной соли в квадратной полости и вытянутой в горизонтальном направлении прямоугольной полости с твердыми, непроницаемыми для вещества границами. Вертикальные границы теплоизолированы, на горизонтальных поддерживаются постоянные температуры, соответствующие нагреву снизу. Вычисления производятся в рамках нестационарного подхода с использованием приближения Буссинеска и с учетом полиномиальной зависимости коэффициента термодиффузии от температуры. В соответствии с этой зависимостью при температуре T^{*} ≈ 285,4 К происходит смена знака коэффициента термодиффузии, приводящая к изменению направления градиента концентрации. Температуры на горизонтальных границах полости выбираются таким образом, что коэффициент термодиффузии меняет знак внутри полости. Другие коэффициенты переноса считаются постоянными. Расчеты выполнены для случаев действия земной и пониженной силы тяжести. Прослежены характеры локальных и интегральных характеристик нелинейных режимов, найдены структура возникающего течения и распределение концентрации поваренной соли. Анализ полученных данных показал, что учет зависимости коэффициента термодиффузии от температуры слабо влияет на структуру и интенсивность образующегося течения, но значительно уменьшает степень разделения компонентов смеси. В поле земной силы тяжести в квадратной полости реализуется колебательное 4-вихревое течение с перезамыканием вихрей, а в прямоугольной полости – многовихревое течение, характеристики которого колеблются нерегулярным образом. При меньшей силе тяжести как в квадратной, так и в прямоугольной полости имеет место стационарное течение. В условиях микрогравитации наблюдается «вмороженность» изолиний концентрации в поле функции тока (то есть оба поля имеют выраженное сходство).

Ключевые слова: конвекция, бинарная смесь, диффузия, термодиффузия, коэффициент термодиффузии

INFLUENCE OF A VARIABLE THERMAL DIFFUSION COEFFICIENT ON CONVECTION OF A BINARY MIXTURE IN RECTANGULAR CAVITIES

T.P. Lyubimova^{1,2}, K.S. Rushinskaya¹ and N.A. Zubova¹

¹Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russian Federation ²Perm National Research State University, Perm, Russian Federation

This paper presents the results of numerical simulation of nonlinear convection regimes of a NaCl aqueous solution in square and horizontally elongated rectangular cavities with hard and impermeable boundaries. The vertical boundaries of the cavities are thermally insulated, and the horizontal ones are maintained at different constant temperatures, which corresponds to heating from below. Calculations are carried out within the non-stationary approach using of Boussinesq approximation and taking into account the polynomial temperature dependence of the thermal diffusion coefficient. According to this approximation, at $T^* \approx 285, 4$ K, the thermal diffusion coefficient changes sign, and thus the direction of the concentration gradient also changes. The temperature gradients on the horizontal boundaries are chosen so that the thermal diffusion coefficient changes sign inside the cavity. Other transport coefficients are considered to be constant. Simulations were performed under Earth-gravity and reduced-gravity conditions. Based on the results of simulations, the local and integral characteristics of non-linear regimes were obtained, and the structure of the emerging flow and the distribution of NaCl concentration were determined. It is shown that the temperature dependence of separation of mixture components. Under the influence of the Earth's gravitational field, an oscillatory four-vortex flow with reconnection of vortices occurs in the square cavity, and a multi-vortex flow - in the rectangular cavity. Under microgravity conditions, the concentration isolines are "frozen" into the structure field, i.e., the similarity between the fields is pronounced.

Key words: convection, binary mixture, diffusion, thermal diffusion, thermal diffusion coefficient

1. Введение

Исследования тепломассопереноса в многокомпонентных смесях с учетом диффузии и термодиффузии имеют общирную область приложений. Примерами могут служить добыча углеводородов [1], фильтрация загрязняющих примесей [2–4], их распространение [5–8], восстановление геотермальной энергии [9]. Аналогичный подход применим и к моделированию сложных биологических жидкостей, коллоидных суспензий, металлов [10–14].

Для учета эффектов диффузии и термодиффузии требуется знать значения коэффициентов переноса. Существует много работ, посвященных определению коэффициентов переноса в конкретных многокомпонентных смесях при различных фиксированных внешних условиях (значениях температуры, давления) и разных соотношениях массовых долей компонентов смеси [15–19]. В ряде работ коэффициенты диффузии и термодиффузии (Соре) найдены как функции температуры и концентрации компонентов смеси [15, 20–27]. Анализ литературы показывает, что бинарные органические жидкие смеси по характеру зависимости коэффициента Соре от температуры и концентрации можно разделить на три группы. Первая группа демонстрирует сохраняющуюся с ростом температуры немонотонную связь коэффициента Соре с концентрацией, которая не меняется с ростом температуры [25, 26]. Для второй группы свойственно также немонотонное уменьшение модуля коэффициента Соре с увеличением температуры, а значение концентрации, при которой происходит смена знака коэффициента Соре, не зависит от температуры [27]. Смеси третьей группы имеют температурную инвариантную точку, в которой на коэффициент Соре, не равный нулю, температура не влияет [15, 26].

Обычно при моделировании конвективных явлений в смесях предполагается, что отклонения температуры и концентрации от средних (или начальных) значений малы, поэтому температурные и концентрационные изменения коэффициентов переноса не учитываются [28–30]. Однако в случае достаточно больших градиентов температуры и концентрации переменность коэффициентов может существенно влиять на поведение смеси. В работе [31] анализируется влияние температурной и концентрационной обусловленности коэффициента Соре на распределение примеси бинарной смеси в отсутствие естественной конвекции.

В настоящей работе исследуются возникновение и нелинейные режимы конвекции водного раствора NaCl в горизонтальной прямоугольной полости при подогреве снизу. Перепад температур между нижней и верхней границами составляет 40 градусов. Моделирование проводится с учетом полиномиальной зависимости коэффициента термодиффузии от температуры [21, 31], особенностью которой является то, что коэффициент термодиффузии при определенном значении температуры меняет знак. В работе выбран для обсуждения такой диапазон температур, что смена знака коэффициента термодиффузии происходит внутри полости. Другие коэффициенты переноса считаются постоянными.

2. Постановка задачи и метод решения

Рассматривается термоконцентрационная конвекция бинарной смеси в квадратной и вытянутой по горизонтали прямоугольной областях при нагреве снизу (Рис. 1). Плотность смеси ρ считается линейно зависящей от температуры T и концентрации примеси C:





 $\rho = \rho_0 \left(1 - \beta_T \left(T - T_0 \right) - \beta_C \left(C - C_0 \right) \right). \tag{1}$

Здесь: $\beta_T = (-1/\rho_0)(\partial \rho/\partial T)|_C$ и $\beta_C = (-1/\rho_0)(\partial \rho/\partial C)|_T$ — коэффициенты теплового и концентрационного расширения соответственно; ρ_0 , C_0 и T_0 — средние значения плотности, концентрации примеси и температуры смеси.

Эффекты бародиффузии и диффузионной теплопроводности в расчет не принимаются. Коэффициенты вязкости v, молекулярной диффузии Dи температуропроводности χ считаются постоянными, а коэффициент термодиффузии D_T предполагается зависящим от температуры по полиномиальному закону в соответствии с работами [21, 31].

С учетом сделанных допущений нестационарные уравнения термоконцентрационной конвекции бинарной смеси в приближении Буссинеска имеют вид:

$$\partial_{t} \boldsymbol{V} + (\boldsymbol{V} \cdot \nabla) \boldsymbol{V} = -\rho_{0}^{-1} \nabla p + \nu \nabla^{2} \boldsymbol{V} + \left[1 - \beta_{T} \left(T - T_{0}\right) - \beta_{C} \left(C - C_{0}\right)\right] \boldsymbol{g},$$
(2)

$$\partial_t T + (\boldsymbol{V} \cdot \nabla) T = \chi \Delta T, \tag{3}$$

$$\partial_{t}C + (\mathbf{V} \cdot \nabla)C = D\Delta C + D_{T}(T)\Delta T, \tag{4}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{V} = \boldsymbol{0} \,. \tag{5}$$

Здесь: V — вектор скорости; p — давление; g — вектор ускорения силы тяжести; символ ∂_t обозначает производную по времени t; ∇ — оператор набла; Δ — двумерный лапласиан.

Границы полости считаются твердыми, непроницаемыми для вещества. Их горизонтальные составляющие поддерживаются при постоянных, но разных температурах, соответствующих подогреву снизу, боковые — теплоизолированы. Граничные условия для концентрации заключаются в равенстве нулю диффузионного потока вещества *J* (Рис. 1):

$$x = 0; l: \quad V = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad J_x = -\rho_0 D \frac{\partial C}{\partial x} + D_T \left(T\right) \frac{\partial T}{\partial x} = 0,$$
 (6)

$$y = 0$$
: $V = 0$, $T = T_{\rm H}$, $J_y = -\rho_0 D \frac{\partial C}{\partial y} + D_T (T) \frac{\partial T}{\partial y} = 0$, (7)

$$y = h$$
: $V = 0$, $T = T_{\rm B}$, $J_y = -\rho_0 D \frac{\partial C}{\partial y} + D_T (T) \frac{\partial T}{\partial y} = 0.$ (8)

Рассмотрены квадратная полость со стороной 0,01 м и прямоугольная полость длиной l = 0,05 м и высотой h = 0,01 м. Температура на нижней границе принималась равной $T_{\rm H} = 318$ K, а на верхней — $T_{\rm B} = 278$ K. Расчеты выполнены для значений ускорения силы тяжести $g: g = g_0$, что соответствует земным условиям, а также при $g = g_0 \cdot 10^{-1}$ и $g = g_0 \cdot 10^{-2}$, то есть в условиях пониженной гравитации.

Объектом исследования служил водный раствор NaCl с массовой долей растворенного вещества $C_0 = 0,0285$ при средней температуре $T_0 = 298$ K. Тепловые и физические параметры этой смеси представлены в таблице и взяты из работ [31–33].

Таблица. Тепловые и физические параметры водного раствора NaCl

ρ_0 , $\kappa r/m^3$	ν , m^2/c	χ , $m^2\!/c$	β_T , K^{-1}	β_c	<i>D</i> , м²/с
1050,0	1,03.10-6	1,47.10-7	1,9.10-4	-0,755	1,512.10-9

Коэффициент термодиффузии считался зависящим от температуры по следующему закону [21, 31]:

$$D_T(T) \approx 10^{-10} (1,463 - 0,00885T + 0,0000131T^2) \,\mathrm{m}^2/(\mathrm{c\cdot K}).$$
 (9)

При температуре $T_0 = 298$ К он равнялся $D_T \approx -1.58 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2/(\text{с-K})$; при разности температур 40 К, согласно (9), внутри области коэффициент термодиффузии менял знак; при температуре $T^* \approx 285,4$ К изменялся от верхней границы полости до нижней в диапазоне от $-2,66 \cdot 10^{-11}$ до $2,33 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/(\text{с-K})$.

В начальный момент времени полагалось, что жидкость неподвижна, концентрация примеси в полости однородна, температура линейно зависит от вертикальной координаты.

Вычисления осуществлялись в программном пакете ANSYS Fluent, реализующем метод конечных объемов. Применялась равномерная по пространственным переменным сетка с квадратными ячейками, шаг сетки составлял $5 \cdot 10^{-5}$ м, шаг по времени был постоянным и равным 1 с. Выбранные размеры расчетной сетки обеспечивали 5 узлов для разрешения концентрационного пограничного слоя. Для дискретизации уравнений использовался второй порядок аппроксимации по времени и третий — по пространству.

3. Численные результаты

При учете полиномиального вида $D_T(T)$ (9) в той части полости, где температура выше $T^* \approx 285,4$ К, коэффициент термодиффузии является отрицательным. Это означает, что, благодаря эффекту термодиффузии, тяжелый компонент смеси накапливается в более нагретой зоне полости, а легкий диффундирует в более холодную зону. В случае подогрева снизу в полости формируется устойчивая стратификация смеси по плотности. Наоборот, при подогреве сверху зависимость плотности от температуры приводит к неустойчивой плотностной стратификации. Тогда, как известно из [34], при определенном значении числа Релея механическое равновесие смеси становится неустойчивым, причем конвекция всегда возбуждается монотонным образом.

В верхней части полости, где температура ниже $T^* \approx 285,4$ К и, согласно (9), коэффициент термодиффузии положителен, под действием термодиффузии возникает устойчивая стратификация по плотности, не вызывающая конвективного течения. Однако можно ожидать, что течение из нижней части полости проникнет и в эту область и, как следствие, произойдет разделение смеси, но оно, по сравнению со случаем постоянного коэффициента термодиффузии, будет меньшим.

3.1. Квадратная полость

3.1.1. Случай действия земной силы тяжести. Рассмотрим воздействие на смесь земной силы тяжести. При этом заданные в настоящей работе условия соответствуют числу Релея $Ra = g\beta_T \Delta Th^3 / (v\chi) \approx 1,23 \cdot 10^5$,



Рис. 2. Временная эволюция в полости максимального значения функции тока (?) (*a*) и разности концентраций между центрами верхней и нижней границ (б) при действии земной силы тяжести



Рис. 3. Фрагмент временной эволюции максимального значения функции тока в полости (a) и изменение поля функции тока за период колебаний (δ) под воздействием земной силы тяжести

что значительно превышает его критическое значение $Ra_c = 2,98 \cdot 10^3$, найденное при постоянном коэффициенте термодиффузии, равном $D_T \approx -1,58 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2/(\text{c}\cdot\text{K}).$

В используемом для расчетов программном пакете ANSYS Fluent Ψ функция тока вводится как $\rho u = \partial \Psi / \partial y$, $\rho v = -\partial \Psi / \partial x$, где и и v х - и у -компоненты вектора скорости. На рисунке 2 представлены данные временной эволюции 0 максимального значения функции тока в полости и разности концентраций примеси между центрами верхней и нижней границ полости, полученные при постоянном значении коэффициента термодиффузии (штриховые линии) и с учетом зависимости (9) (сплошные линии). Как видно, учет $D_{\tau}(T)$ как функции температуры слабо влияет на образование неустойчивости И формирование течения. Течение как в случае постоянного коэффициента

термодиффузии, так и при зависимости его от температуры возникает очень быстро (практически отсутствует бесконвективный период при малых временах), затем имеет место переход к колебательному режиму (Рис. 2*a*). При учете $D_T(T)$ происходит лишь некоторое увеличение интенсивности течения. Влияние изменения направления градиента концентрации внутри полости на разделение смеси более существенно, оно приводит к тому, что максимальное разделение смеси в случае переменного коэффициента термодиффузии ниже, чем при его постоянном значении, примерно в 1,4 раза (Рис. 2*b*).

С течением времени устанавливается режим стационарных колебаний с перезамыканием вихрей (Рис. 3), аналогичный наблюдаемому в работе [35] при постоянном коэффициенте термодиффузии. Распределение концентрации в полости однородно в ее центральной части и сильно меняется возле границ (Рис. 4*a*, *б*). На рисунке 4*б* штриховой линией показана изотерма $T^* = 285, 4$ К, разграничивающая области, в которых коэффициент термодиффузии имеет разные знаки. Область, где $D_T(T)$ положителен, за счет сильного течения прижата к верхней границе полости. Профили концентрации демонстрируют сильные, по сравнению с течением при постоянном D_T , изменения возле горизонтальных границ полости, также связанные со сменой знака коэффициента термодиффузии в верхней части полости (Рис. 4*e*). Градиенты концентрации в областях ниже и выше изотермы $T^* = 285, 4$ К направлены к ней; максимальное значение



Рис. 4. Распределение концентрации примеси в условиях земной гравитации в момент времени t = 60 с при постоянном (*a*) и зависящем от температуры (*б*) коэффициенте термодиффузии (штриховая линия – изотерма $T^* = 285,4$ K, вдоль которой $D_T(T) \approx 0 \text{ m}^2/(\text{c} \cdot \text{K})$); профили концентрации (*в*) вдоль линии x = 0,005 м (символ X соответствует точке, где коэффициент термодиффузии меняет знак)

концентрации примеси вдоль линии x = 0,005 м в случае зависящего от температуры коэффициента термодиффузии достигается именно в точке смены знака $D_T(T)$, в то время как при постоянном D_T максимального значения концентрация смеси достигает на верхней границе полости.

3.1.2. Сила тяжести, в десять раз меньшая земной. При понижении величины силы тяжести конвекция возникает позже: резкий рост интенсивности течения наблюдается при $t \approx 50$ с (Рис. 5*a*). В дальнейшем в полости формируется стационарное течение. Поскольку внутри полости происходит смена знака коэффициента термодиффузии при учете, что $D_T(T)$, степень максимального разделения смеси в этом случае уменьшается по сравнению со степенью при постоянном значении D_T примерно в 1,2 раза (Рис. 5*б*). Это чуть ниже, чем в условиях земной гравитации.



Рис. 5. Временная эволюция максимального значения функции тока в полости (*a*) и разности концентраций между центрами верхней и нижней границ (*б*) при силе тяжести, в десять раз меньшей земной

Стационарное течение, возникающее при силе тяжести, в десять раз меньшей земной, имеет 2-вихревую форму как при постоянном значении коэффициента термодиффузии, так и при $D_T(T)$. (Рис. 6*a*). Поскольку число Шмидта велико (Sc = v/D = 681), изолинии концентрации «вморожены» в поле течения (то есть оба поля имеют выраженное сходство). Имеются две области, где концентрация практически постоянна, а градиенты наблюдаются вблизи границ полости и на границах вихрей (Рис. 66).



Рис. 6. Изолинии функции тока (*a*), распределение концентрации (δ) при зависящем от температуры коэффициенте термодиффузии; профили концентрации (*в*) вдоль линии x = 0,005 м при силе тяжести, в десять раз меньшей земной, в момент времени t = 1000 с

В верхней части полости сказывается влияние смены знака коэффициента термодиффузии — максимального значения концентрация достигает в точке, где $D_T(T) \approx 0 \,\mathrm{m}^2/(\mathrm{c}\cdot\mathrm{K})$, к которой направлены градиенты концентрации (Рис. 66). Максимальное значение концентрации в случае постоянного коэффициента термодиффузии имеет место на верхней границе полости.

3.1.3. Сила тяжести, в сто раз меньшая земной. При силе тяжести, в сто раз меньшей земной, в квадратной полости реализуется слабое стационарное течение (Рис. 7*a*), которое появляется после достаточно продолжительного бесконвективного периода. Возникновение конвекции сопровождается ростом интенсивности движения, происходящим на отрезке времени от 500 до 850 с. Разделение смеси в стационарном режиме при постоянном значении коэффициента термодиффузии примерно в 1,4 раза выше, чем при учете зависимости $D_{T}(T)$ (Рис. 66).



Рис. 7. Временная эволюция максимального значения функции тока в полости (*a*) и разности концентраций между центрами верхней и нижней границ (*б*) при силе тяжести, в сто раз меньшей земной

Структура стационарного течения одновихревая (Рис. 8) как при постоянном коэффициенте термодиффузии, так и при $D_T(T)$. При учете температурной зависимости, как и в предыдущем случае, наблюдается «вмороженность» изолиний концентрации в поле течения (Рис. 8*б*, *в*). Профиль концентрации вдоль линии x = 0,005 м при переменном коэффициенте термодиффузии, показанном на рисунке 8*г* сплошной линией, значительно отличается от профиля, полученного при постоянном D_T (Рис. 8*г*, штриховая линия) и качественно похож на профиль в условиях отсутствия конвекции, представленный в работе [31].



Рис. 8. Изолинии функции тока при зависящем от температуры коэффициенте термодиффузии (*a*), распределение изолиний концентрации при постоянном (δ) и переменном (*в*) коэффициенте термодиффузии; профили концентрации (*г*) вдоль линии x = 0,005 м при силе тяжести, в сто раз меньшей земной, в момент времени t = 3600 с

3.2. Прямоугольная полость

3.2.1. Земная гравитация. Рассмотрим поведение смеси в прямоугольной полости длиной l = 0,05 м и высотой h = 0,01 м. На рисунке 9 представлены графики временной эволюции максимального значения функции тока в полости и разности концентраций между центрами верхней и нижней границ полости при постоянном ($D_T \approx -1,58 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/(\text{c-K})$) и переменном ($D_T(T)$ (9)) коэффициенте термодиффузии. Как видно из рисунка, учет зависимости (9) слабо влияет на интенсивность течения, возникающего в полости. В обеих ситуациях наблюдается практически полное отсутствие бесконвективного периода при малых временах, затем образуется сильное течение, имеющее форму нерегулярных колебаний (Рис. 9*a*). Интенсивность течения несколько выше в случае $D_T(T)$, и разделение смеси при этом наступает позже, а его максимальное значение меньше (Рис. 96).



Рис. 9. Временная эволюция максимального значения функции тока в полости (*a*) и разности концентраций между центрами верхней и нижней границ (*б*) в условиях земной гравитации

При постоянном и переменном коэффициенте термодиффузии структура течения 4-вихревая, однако в первом случае имеется еще два вихря, более ярко выраженных, чем при зависящем от температуры коэффициенте термодиффузии (Рис. 10). Изолинии концентрации показывают, что в средней части полости ее распределение однородно, а заметные изменения наблюдаются около границ полости (Рис. 11*a*, δ). На рисунке 11*в*, где представлены вертикальные профили концентрации, видно влияние смены знака коэффициента термодиффузии, а также наличие однородности в распределении концентрации в центральной части полости и ее отсутствие у границ.



Рис. 10. Изолинии функции тока при постоянном (*a*) и зависящем от температуры (δ) коэффициенте термодиффузии при действии земной силы тяжести в момент времени t = 200 с



Рис. 11. Распределение концентрации примеси при постоянном (*a*) и зависящем от температуры (*б*) коэффициенте термодиффузии и профили концентрации (*в*) вдоль линии *x* = 0,005 м при земной силе тяжести в момент времени *t* = 200 с

3.2.2. Гравитация, в десять раз меньшая земной. В случае, когда сила тяжести понижена в десять раз относительно земной, появляется бесконвективный период на протяжении $t \approx 20$ с от начала процесса (см. Рис. 12*a*). В течение этого периода происходит близкое к чисто диффузионному разделение смеси (Рис. 12*b*). Затем возникает конвекция, сопровождающаяся резким увеличением интенсивности течения и еще большим ростом степени разделения смеси. Далее течение выходит на стационарный режим. При рассматриваемой величине силы тяжести наибольшие значения разности концентрации примеси в полости в случаях постоянного и переменного коэффициента термодиффузии различаются сильнее, чем при действии земной силы тяжести. Еще заметнее различия по сравнению с квадратной полостью — приблизительно в 1,8 раза (Рис. 12*b*).



Рис. 12. Временная эволюция максимального значения функции тока в полости (*a*) и разности концентраций между центрами верхней и нижней границ (*б*) при силе тяжести, в десять раз меньшей земной

Установившееся в данных условиях стационарное течение имеет 9-вихревую структуру при постоянном D_T и 8-вихревую при переменном $D_T(T)$ (Рис. 13). По сравнению со случаем действия земной силы тяжести наблюдается уменьшение пространственного масштаба конвективных вихрей. Число Шмидта велико, из-за этого изолинии концентрации «вморожены» в поле скорости. Появляются девять областей при постоянном коэффициенте термодиффузии и восемь при наличии зависимости D_T от температуры, соответствующих вихрям на рисунке 13; в этих областях концентрация практически однородна, причем при коэффициенте термодиффузии, меняющем знак внутри полости, «вмороженность» выражена более четко (Рис. 14*a*, δ). Профили концентрации показывают, что, как и при действии земной силы тяжести, значение концентрации мало отличается от начального в центральной части полости и значительно — у границ. Однако различие течений смеси с постоянным и переменным коэффициентами термодиффузии при данном уровне гравитации заметнее, потому что в центральной части происходит некоторое отклонение от равновесного значения (Рис. 14*a*). В случае течения при постоянном коэффициентами термодиффузии, в отличие от течения с переменным $D_T(T)$, концентрация примеси наибольшая у верхней границы полости.



Рис. 13. Изолинии функции тока при постоянном (*a*) и зависящем от температуры (*б*) коэффициенте термодиффузии при силе тяжести, в десять раз меньшей земной, в момент времени *t* = 300 с



Рис. 14. Распределение концентрации примеси при постоянном (*a*) и зависящем от температуры (δ) коэффициенте термодиффузии и профили концентрации вдоль линии x = 0,005 м (*в*) при тяжести, в десять раз меньше земной, в момент времени t = 300 с

3.2.3. Гравитация, в сто раз меньшая земной. В поле пониженной силы тяжести в прямоугольной полости наблюдается продолжительный бесконвективный период, приблизительно 250 с (Рис. 15а). Дальнейший рост интенсивности течения также длится достаточно долго: выход на стационарный режим происходит в момент времени около 450 с. При переменном коэффициенте термодиффузии усиление смесь разделения смеси осуществляется медленнее, чем при постоянном (Рис. 15б). Разделение смеси в стационарном режиме при этом уменьшается в 1,6 раза по сравнению со случаем постоянного коэффициента термодиффузии.



Рис. 15. Временная эволюция максимального значения функции тока в полости (*a*) и разности концентраций между центрами верхней и нижней границ (*б*) при силе тяжести, в сто раз меньшей земной



Рис. 16. Изолинии функции тока при зависящем от температуры коэффициенте термодиффузии при силе тяжести, в сто раз меньшей земной, в момент времени *t* = 2000 с

Структура течения при t = 2000 с, что соответствует стационарному режиму, представлена на рисунке 16. Видно, что течение имеет 6-вихревую форму. Изолинии концентрации, как и при пониженной в 10 раз силе тяжести, «вморожены» в поле функции тока. При переменном коэффициенте термодиффузии изолинии концентрации отличаются от полученных при моделировании в случае постоянного коэффициента термодиффузии; из-за смены знака концентрация достигает максимального значения не у границы полости, а в ее центральной части (Рис. 17*a*, δ), поэтому распределение смеси NaCl вдоль вертикальной центральной линии в средней части полости близко к начальному на рисунке 17*a* и заметно отличается от начального на на рисунке 17*b*. У горизонтальных границ концентрация резко меняется (Рис. 17*b*).



Рис. 17. Распределение концентрации примеси при постоянном (*a*) и зависящем от температуры (δ) коэффициенте термодиффузии и профили концентрации (*в*) вдоль линии x = 0,005 м при силе тяжести, в сто раз меньшей земной, в момент времени t = 2000 с

4. Заключение

Представлены результаты численного моделирования формирования и развития нелинейных режимов конвекции водного раствора поваренной соли в квадратной и прямоугольной, вытянутой в горизонтальном направлении, полостях. Расчеты выполнены с учетом зависимости коэффициента термодиффузии

от температуры $D_T(T)$ по полиномиальному закону. Рассмотрен подогрев снизу; создаваемая при этом

разность температур между горизонтальными границами равна 40 К. При такой разности температур у смеси внутри полости происходит смена знака коэффициента термодиффузии, что приводит к изменению направления градиента концентрации. Исследовано возникновение и развитие конвективных режимов в условиях земной и пониженной силы тяжести. В случае квадратной полости при земной силе тяжести формируется колебательное 4-вихревое течение с перезамыканием вихрей. При снижении силы тяжести течение становится стационарным 2-вихревым, а при еще меньшей гравитации — одновихревым. В прямоугольной полости при земной силе тяжести наблюдаются нерегулярные колебания значений характеристик течения. При снижении силы тяжести течение становится стационарным, его пространственный масштаб уменьшается.

Интенсивность течения достаточно высока, поэтому в центральной части полости поддерживается однородное распределение смеси. Возле границ имеют место большие градиенты концентрации примеси. Учет полиномиальной зависимости коэффициента термодиффузии от температуры слабо влияет на характер течения, однако смена знака коэффициента термодиффузии внутри полости приводит к значительному уменьшению, по сравнению с течением смеси при постоянном коэффициенте термодиффузии, максимальной степени разделения компонентов.

Работа выполнена при финансовой поддержке правительства Пермского края (Программа поддержки Научных школ Пермского края, Соглашение № С-26/788).

Литература

- Galliero G., Bataller H., Croccolo F., Vermorel R., Artola P.-A., Rousseau B., Vesovic V., Bou-Ali M., Ortiz de Zárate J.M., Xu S., Zhang K., Montel F. Impact of thermodiffusion on the initial vertical distribution of species in hydrocarbon reservoirs // Microgravity Sci. Technol. 2016. Vol. 28. P. 79-86. https://doi.org/10.1007/s12217-015-9465-6
- Maryshev B.S., Lyubimova T.P., Lyubimov D.V. Stability of homogeneous seepage of a liquid mixture through a closed region of the saturated porous medium in the presence of the solute immobilization // Int. J. Heat Mass Tran. 2016. Vol. 102. P. 113-121. https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.06.016
- 3. *Soboleva E.B.* Density-driven convection in an inhomogeneous geothermal reservoir // Int. J. Heat Mass Tran. 2018. Vol. 127. P. 784-798. https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.08.019
- 4. Клименко Л.С., Марышев Б.С. Очистка микроканала внешним ламинарным потоком // Вестник Пермского университета. Физика. 2020. № 3. С. 5-13. https://doi.org/10.17072/1994-3598-2020-3-05-13
- 5. Любимова Т.П., Лепихин А.П., Паршакова Я.Н., Циберкин К.Б. Численное моделирование инфильтрации жидких отходов из хранилища в прилегающие грунтовые воды и поверхностные водоёмы // Вычисл. мех. сплош. сред. 2015. Т. 8, № 3. С. 310-318. https://doi.org/10.7242/1999-6691/2015.8.3.26
- Sasmito A.P., Birgersson E., Ly H.C., Mujumdar A.S. Some approaches to improve ventilation system in underground coal mines environment – A computational fluid dynamic study // Tunnelling and Underground Space Technology. 2013. Vol. 34. P. 82-95. https://doi.org/10.1016/j.tust.2012.09.006
- 7. Любимова Т.П., Лепихин А.П., Паршакова Я.Н. Численное моделирование отведения высокоминерализованных сточных вод в водные объекты с целью усовершенствования конструкций выпускных устройств // Вычисл. мех. сплош. сред. 2019. Т. 12, № 4. С. 427-434. https://doi.org/10.7242/1999-6691/2019.12.4.36
- 8. Лепихин А.П., Возняк А.А., Любимова Т.П., Паршакова Я.Н., Ляхин Ю.С., Богомолов А.В. Исследование особенностей формирования и масштабов диффузного загрязнения, сформированного крупными промышленными комплексами, на примере Соликамско-Березниковского промузла // Водные ресурсы. 2020. Т. 47, № 5. С. 560-566. https://doi.org/10.31857/S0321059620050120
- Barvier E. Geothermal energy technology and current status: an overview // Renew. Sustain. Energ. Rev. 2002. Vol. 6. P. 3-65. https://doi.org/10.1016/S1364-0321(02)00002-3
- Kishikawa Y., Shinohara H., Maeda K., Nakamura Y., Wiegand S., Kita R. Temperature dependence of thermal diffusion for aqueous solutions of monosaccharides, oligosaccharides, and polysaccharides // Phys. Chem. Chem. Phys. 2012. Vol. 14. P. 10147-10153. https://doi.org/10.1039/c2cp41183k
- 11. D'Errico G., Ortona O., Paduano L., Sartorio R. Diffusion properties of the ternary system human serum albumin–sodium cholate–water // J. Solution Chem. 2014. Vol. 43. P. 893-915. https://doi.org/10.1007/s10953-014-0179-y
- 12. Shliomis M.I., Souhar M. Self-oscillatory convection caused by the Soret effect // EPL. 2000. Vol. 49. P. 55-61. http://dx.doi.org/10.1209/epl/i2000-00119-4
- 13. Черепанов И.Н., Смородин Б.Л. Колебательная конвекция коллоидной суспензии в горизонтальной ячейке // Вычисл. мех. сплош. сред. 2020. Т. 13, № 3. С. 247-255. https://doi.org/10.7242/1999-6691/2020.13.3.19
- 14. Демин В.А., Мизев А.И., Петухов М.И., Шмыров А.В. Разделение легкоплавких металлических расплавов в тонком наклонном капилляре // Изв. РАН. МЖГ. 2019. № 1. С. 3-16. https://doi.org/10.1134/S0568528119010043
- Kolodner P., William H., Moe C. Optical measurement of the Soret coefficient of ethanol/water solutions // J. Chem. Phys. 1988. Vol. 88. P. 6512-6524. https://doi.org/10.1063/1.454436
- 16. Leahy-Dios A., Firoozabadi A. Molecular and thermal diffusion coefficients of alkane-alkane and alkane-aromatic binary mixtures: Effect of shape and size of molecules // J. Phys. Chem. B. 2007. Vol. 111. P. 191-198. https://doi.org/10.1021/jp064719q
- 17. *Mialdun A., Shevtsova V.M.* Development of optical digital interferometry technique for measurement of thermodiffusion coefficients // Int. J. Heat Mass Tran. 2008. Vol. 51. P. 3164-3178. https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.08.020

- Königer A., Meier B., Köhler W. Measurement of the Soret, diffusion, and thermal diffusion coefficients of three binary organic benchmark mixtures and of ethanol/water mixtures using a beam deflection technique // Phil. Mag. 2009. Vol. 89. P. 907-923. https://doi.org/10.1080/14786430902814029
- 19. Blanco P., Bou-Ali M.M., Platten J.K., de Mezquia D.A., Madariaga J.A., Santamaría C. Thermodiffusion coefficients of binary and ternary hydrocarbon mixtures // J. Chem. Phys. 2010. Vol. 132. 114506. https://doi.org/10.1063/1.3354114
- 20. Vitagliano V., Lyons P.A. Diffusion coefficients for aqueous solutions of sodium chloride and barium chloride // J. Am. Chem. Soc. 1956. Vol. 78. P. 1549-1552. https://doi.org/10.1021/ja01589a011
- 21. Caldwell D.R. Measurement of negative thermal diffusion coefficients by observing the onset of thermohaline convection // J. Phys. Chem. 1973. Vol. 77. P. 2004-2008. https://doi.org/10.1021/j100635a018
- 22. *Caldwell D.R., Eide S.A.* Soret coefficient and isothermal diffusivity of aqueous solutions of five principal salt constituents of seawater // Deep Sea Res. Oceanogr. Res. Paper. 1981. Vol. 28. P. 1605-1618. https://doi.org/10.1016/0198-0149(81)90100-X
- 23. Chang Y.C., Myerson A.S. The diffusivity of potassium chloride and sodium chloride in concentrated, saturated, and supersaturated aqueous solutions // AlChE J. 1985. Vol. 31. P. 890-894. https://doi.org/10.1002/aic.690310603
- 24. Mialdun A., Shevtsova V. Temperature dependence of Soret and diffusion coefficients for toluene–cyclohexane mixture measured in convection-free environment // J. Chem. Phys. 2015. Vol. 143. 224902. https://doi.org/10.1063/1.4936778
- 25. Johnson J.-C.C., Beyerlein A.L. Thermal diffusion in mixtures with associated reactions. Thermal diffusion factors for methanol-benzene mixtures // J. Phys. Chem. 1978. Vol. 82. P. 1430-1436. https://doi.org/10.1021/j100501a021
- 26. Wittko G., Kohler W. On the temperature dependence of thermal diffusion of liquid mixtures // EPL. 2007. Vol. 78. 46007. https://doi.org/10.1209/0295-5075/78/46007
- 27. Zhang K.J., Briggs M.E., Gammon R.W., Sengers J.V. Optical measurement of the Soret coefficient and the diffusion coefficient of liquid mixtures // J. Chem. Phys. 1996. Vol. 104. P. 6881-6892. https://doi.org/10.1063/1.471355
- 28. *Ghorayeb K., Firoozabadi A.* Modeling multicomponent diffusion and convection in porous media // SPE J. 2000. Vol. 5. P. 158-171. https://doi.org/10.2118/62168-PA
- 29. Shevtsova V.M., Melnikov D.E., Legros J.C. Onset of convection in Soret-driven instability // Phys. Rev. E. 2006. Vol. 73. 047302. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.73.047302
- 30. Lyubimova T., Zubova N., Shevtsova V. Effects of non-uniform temperature of the walls on the Soret experiment // Microgravity Sci. Technol. 2019. Vol. 31. P. 1-11. https://doi.org/10.1007/s12217-018-9666-x
- 31. *Ryzhkov I.I., Stepanova I.V.* On thermal diffusion separation in binary mixtures with variable transport coefficients // Int. J. Heat Mass Tran. 2015. Vol. 86. P. 268-276. https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.02.069
- 32. Weast R.C. (Ed.) Handbook of chemistry and physics. CRC Press, 1977.
- 33. Cooper C.A., Glass R.J., Tyler S.W. Effect of buoyancy ratio on the development of double-diffusive finger convection in a Hele-Shaw cell // Water Resour. Res. 2001. Vol. 37. P. 2323-2332. https://doi.org/10.1029/2001WR000343
- 34. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
- 35. Lyubimova T., Rushinskaya K., Zubova N. Onset and nonlinear regimes of convection of a binary mixture in rectangular cavity heated from below // Microgravity Sci. Technol. 2020. Vol. 32. P. 961-972. https://doi.org/10.1007/s12217-020-09823-x

References

- Galliero G., Bataller H., Croccolo F., Vermorel R., Artola P.-A., Rousseau B., Vesovic V., Bou-Ali M., Ortiz de Zárate J.M., Xu S., Zhang K., Montel F. Impact of thermodiffusion on the initial vertical distribution of species in hydrocarbon reservoirs. *Microgravity Sci. Technol.*, 2016, vol. 28, pp. 79-86. https://doi.org/10.1007/s12217-015-9465-6
- Maryshev B.S., Lyubimova T.P., Lyubimov D.V. Stability of homogeneous seepage of a liquid mixture through a closed region of the saturated porous medium in the presence of the solute immobilization. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 2016, vol. 102, pp. 113-121. https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.06.016
- 3. Soboleva E.B. Density-driven convection in an inhomogeneous geothermal reservoir. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 2018, vol. 127, pp. 784-798. https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.08.019
- 4. Klimenko L.S., Maryshev B.S. Microchannel cleaning by the external laminar flow. *Vestnik Permskogo universiteta*. *Fizika Bulletin of Perm University. Physics*, 2020, no. 3, pp. 5-13. https://doi.org/10.17072/1994-3598-2020-3-05-13
- Lyubimova T.P., Lepikhin A.P., Parshakova Ya.N., Tsiberkin K.B. Numerical modeling of liquid-waste infiltration from storage facilities into surrounding groundwater and surface-water bodies. J. Appl. Mech. Tech. Phy., 2016, vol. 57, pp. 1208-1216. https://doi.org/10.1134/S0021894416070099
- Sasmito A.P., Birgersson E., Ly H.C., Mujumdar A.S. Some approaches to improve ventilation system in underground coal mines environment – A computational fluid dynamic study. *Tunnelling and Underground Space Technology*, 2013, vol. 34, pp. 82-95. https://doi.org/10.1016/j.tust.2012.09.006
- Lyubimova T.P., Lepikhin A.P., Parshakova Ya.N. Numerical simulation of wastewater discharge into water objects to improve discharge devices. *Vychisl. mekh. splosh. sred – Computational Continuum Mechanics*, 2019, vol. 12, no. 4, pp. 427-434. https://doi.org/10.7242/1999-6691/2019.12.4.36
- Lepikhin A.P., Voznyak A.A., Lyubimova T.P., Parshakova Ya.N, Lyakhin Yu.S., Bogomolov A.V. Studying the formation features and the extent of diffuse pollution formed by large industrial complexes: case study of the Solikamsk– Berezniki industrial hub. *Water Resour.*, 2020, vol. 47, pp. 744-750. https://doi.org/10.1134/S0097807820050127
- Barvier E. Geothermal energy technology and current status: an overview. *Renew. Sustain. Energ. Rev.*, 2002, vol. 6, pp. 3-65. https://doi.org/10.1016/S1364-0321(02)00002-3
- Kishikawa Y., Shinohara H., Maeda K., Nakamura Y., Wiegand S., Kita R. Temperature dependence of thermal diffusion for aqueous solutions of monosaccharides, oligosaccharides, and polysaccharides. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2012, vol. 14, pp. 10147-10153. https://doi.org/10.1039/c2cp41183k

- 11. D'Errico G., Ortona O., Paduano L., Sartorio R. Diffusion properties of the ternary system human serum albumin-sodium cholate-water. J. Solution Chem., 2014, vol. 43, pp. 893-915. https://doi.org/10.1007/s10953-014-0179-y
- 12. Shliomis M.I., Souhar M. Self-oscillatory convection caused by the Soret effect. *EPL*, 2000, vol. 49, pp. 55-61. http://dx.doi.org/10.1209/epl/i2000-00119-4
- Cherepanov I.N., Smorodin B.L. Oscillatory convection of a colloidal suspension in a horizontal cell. *Vychisl. mekh. splosh.* sred – Computational Continuum Mechanics, 2020, vol. 13, no. 3, pp. 247-255. https://doi.org/10.7242/1999-6691/2020.13.3.19
- Demin V.A., Mizev A.I., Petukhov M.I., Shmyrov A.V. Separation of low-melting metal melts in a thin inclined capillary. *Fluid Dyn.*, 2019, vol. 54, pp. 1-13. https://doi.org/10.1134/S001546281901004X
- Kolodner P., William H., Moe C. Optical measurement of the Soret coefficient of ethanol/water solutions. J. Chem. Phys., 1988, vol. 88, pp. 6512-6524. https://doi.org/10.1063/1.454436
- Leahy-Dios A., Firoozabadi A. Molecular and thermal diffusion coefficients of alkane-alkane and alkane-aromatic binary mixtures: Effect of shape and size of molecules. J. Phys. Chem. B, 2007, vol. 111, pp. 191-198. https://doi.org/10.1021/jp064719q
- 17. Mialdun A., Shevtsova V.M. Development of optical digital interferometry technique for measurement of thermodiffusion coefficients. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 2008, vol. 51, pp. 3164-3178. https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.08.020
- Königer A., Meier B., Köhler W. Measurement of the Soret, diffusion, and thermal diffusion coefficients of three binary organic benchmark mixtures and of ethanol/water mixtures using a beam deflection technique. *Phil. Mag.*, 2009, vol. 89, pp. 907-923. https://doi.org/10.1080/14786430902814029
- Blanco P., Bou-Ali M.M., Platten J.K., de Mezquia D.A., Madariaga J.A., Santamaría C. Thermodiffusion coefficients of binary and ternary hydrocarbon mixtures. J. Chem. Phys., 2010, vol. 132, 114506. https://doi.org/10.1063/1.3354114
- Vitagliano V., Lyons P.A. Diffusion coefficients for aqueous solutions of sodium chloride and barium chloride. J. Am. Chem. Soc., 1956, vol. 78, pp. 1549-1552. https://doi.org/10.1021/ja01589a011
- Caldwell D.R. Measurement of negative thermal diffusion coefficients by observing the onset of thermohaline convection. J. Phys. Chem., 1973, vol. 77, pp. 2004-2008. https://doi.org/10.1021/j100635a018
- 22. Caldwell D.R., Eide S.A. Soret coefficient and isothermal diffusivity of aqueous solutions of five principal salt constituents of seawater. *Deep Sea Res. Oceanogr. Res. Paper.*, 1981, vol. 28, pp. 1605-1618. https://doi.org/10.1016/0198-0149(81)90100-X
- 23. Chang Y.C., Myerson A.S. The diffusivity of potassium chloride and sodium chloride in concentrated, saturated, and supersaturated aqueous solutions. *AlChE J.*, 1985, vol. 31, pp. 890-894. https://doi.org/10.1002/aic.690310603
- 24. Mialdun A., Shevtsova V. Temperature dependence of Soret and diffusion coefficients for toluene–cyclohexane mixture measured in convection-free environment. *J. Chem. Phys.*, 2015, vol. 143, 224902. https://doi.org/10.1063/1.4936778
- Johnson J.-C.C., Beyerlein A.L. Thermal diffusion in mixtures with associated reactions. Thermal diffusion factors for methanol-benzene mixtures. J. Phys. Chem., 1978, vol. 82, pp. 1430-1436. https://doi.org/10.1021/j100501a021
- 26. Wittko G., Kohler W. On the temperature dependence of thermal diffusion of liquid mixtures. *EPL*, 2007, vol. 78, 46007. https://doi.org/10.1209/0295-5075/78/46007
- Zhang K.J., Briggs M.E., Gammon R.W., Sengers J.V. Optical measurement of the Soret coefficient and the diffusion coefficient of liquid mixtures. J. Chem. Phys., 1996, vol. 104, pp. 6881-6892. https://doi.org/10.1063/1.471355
- Ghorayeb K., Firoozabadi A. Modeling multicomponent diffusion and convection in porous media. SPE J., 2000, vol. 5, pp. 158-171. https://doi.org/10.2118/62168-PA
- 29. Shevtsova V.M., Melnikov D.E., Legros J.C. Onset of convection in Soret-driven instability. *Phys. Rev. E*, 2006, vol. 73, 047302. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.73.047302
- Lyubimova T., Zubova N., Shevtsova V. Effects of non-uniform temperature of the walls on the Soret experiment. *Microgravity Sci. Technol.*, 2019, vol. 31, pp. 1-11. https://doi.org/10.1007/s12217-018-9666-x
- 31. Ryzhkov I.I., Stepanova I.V. On thermal diffusion separation in binary mixtures with variable transport coefficients. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 2015, vol. 86, pp. 268-276. https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.02.069
- 32. Weast R.C. (Ed.) Handbook of chemistry and physics. CRC Press, 1977.
- Cooper C.A., Glass R.J., Tyler S.W. Effect of buoyancy ratio on the development of double-diffusive finger convection in a Hele-Shaw cell. *Water Resour. Res.*, 2001, vol. 37, pp. 2323-2332. https://doi.org/10.1029/2001WR000343
- 34. Gershuni G.Z., Zhukhovitskii E.M. Convective stability of incompressible fluids. Keter Publishing House, 1976. 330 pp.
- 35. Lyubimova T., Rushinskaya K., Zubova N. Onset and nonlinear regimes of convection of a binary mixture in rectangular cavity heated from below. *Microgravity Sci. Technol.*, 2020, vol. 32, pp. 961-972. https://doi.org/10.1007/s12217-020-09823-x

Поступила в редакцию 22.03.2021; после доработки 08.06.2021; принята к опубликованию 09.06.2021

Сведения об авторах

Рушинская Ксения Сергеевна, асп., ИМСС УрО РАН; e-mail: ksr7777777@yandex.ru

Любимова Татьяна Петровна, дфмн, проф., зав. лаб., Институт механики сплошных сред УрО РАН (ИМСС УрО РАН), 614018, г. Пермь, ул. Академика Королёва, д. 1; e-mail: lyubimovat@mail.ru

Зубова Надежда Алексеевна, кфмн, нс, ИМСС УрО РАН; e-mail: zubova.n@icmm.ru