

ISSN 1995-2732 (Print), 2412-9003 (Online)
УДК 620.93
DOI: 10.18503/1995-2732-2026-24-3-171-179



ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫРАВНИВАНИЯ ПЛОТНОСТИ В ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ГАЗОВОЙ СМЕСИ ВЯЗКИХ СЖИМАЕМЫХ ТЕПЛОПРОВОДНЫХ ГАЗОВ

Тукмаков А.Л.¹, Тукмаков Д.А.¹, Ахунов А.А.²

¹Институт механики и машиностроения Казанского научного центра Российской академии наук, Казань, Россия

²Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

Аннотация. Постановка задачи (актуальность работы). Течения многокомпонентных газовых смесей встречаются в различных промышленных технологиях. В связи с этим возникает задача исследования динамических процессов в многокомпонентных газовых смесях. Исследуются как технологии разделения газовых смесей, так и течения гомогенных смесей газов в различных промышленных аппаратах. **Цель работы.** Целью работы является как исследование процесса выравнивания плотности смеси с начальным неравномерным распределением компонентов газовой смеси. **Используемые методы.** Для описания данного процесса существует несколько подходов, в данной работе применен подход, основанный на решении полной гидродинамической системы уравнений движения. Применяется диффузионное приближение динамики неоднородных сред, описывающее течение вязкой, сжимаемой и теплопроводной среды с учетом двухкомпонентного состава и взаимной диффузии компонентов. Для каждого из компонентов смеси решалось уравнение неразрывности с учетом взаимной диффузии компонентов. Система уравнений интегрировалась явным конечно-разностным методом второго порядка точности со схемой расщепления по пространственным направлениям. Для подавления численных осцилляций применялась схема нелинейной коррекции численного решения. **Новизна.** В математической модели учитывалась двумерная геометрия, вязкость, сжимаемость и теплопроводность смеси, а также диффузия компонентов смеси. **Результат.** В работе получены результаты, демонстрирующие транспортные свойства численной схемы. Также выявлено, что процесс выравнивания средней плотности смеси сопровождается колебательным процессом плотности смеси. Предоставлены временные зависимости общей плотности смеси в различных точках расчетной области и двумерные графики распределения параметров смеси. **Практическая значимость.** Практической значимостью было выявление свойств численной модели для исследования динамических процессов в гомогенных газовых смесях.

Ключевые слова:

Работа выполнялась в рамках государственного задания Федерального исследовательского центра Казанского научного центра Российской академии наук.

© Тукмаков А.Л., Тукмаков Д.А., Ахунов А.А., 2026

Для цитирования

Тукмаков А.Л., Тукмаков Д.А., Ахунов А.А. Численное моделирование выравнивания плотности в двухкомпонентной газовой смеси вязких сжимаемых теплопроводных газов // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. 2026. Т. 24. №3. С. 171-179. <https://doi.org/10.18503/1995-2732-2026-24-3-171-179>



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.
The content is available under Creative Commons Attribution 4.0 License.

NUMERICAL SIMULATION OF DENSITY EQUALIZATION IN A TWO-COMPONENT GAS MIXTURE OF VISCOUS, COMPRESSIBLE, HEAT-CONDUCTING GASES

Tukmakov A.L.¹, Tukmakov D.A.¹, Akhunov A.A.²

¹Institute of Mechanics and Engineering, Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences, Kazan, Russia

²Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev-KAI, Kazan, Russia

Abstract. Problem Statement (Relevance). Multicomponent gas mixture flows occur in various industrial processes. Therefore, studying dynamic processes in multicomponent gas mixtures is an important research task. Both gas mixture separation technologies and flows of homogeneous gas mixtures in various industrial units are investigated. **Objectives.** The aim of this work is to investigate the density equalization process in a mixture with an initially nonuniform distribution of gas mixture components. **Methods Applied.** Several approaches can be used to describe this process. In this study, an approach based on solving the complete hydrodynamic system of governing equations is employed. A diffusion approximation for the dynamics of heterogeneous media is used to describe the flow of a viscous, compressible, heat-conducting medium, taking into account its two-component composition and mutual diffusion of the components. For each component of the mixture, the continuity equation has been solved with allowance for mutual diffusion between the components. The system of equations has been integrated using an explicit second-order finite-difference method with a splitting scheme in the spatial directions. A nonlinear correction scheme for the numerical solution has been employed to suppress numerical oscillations. **Originality.** The mathematical model takes into account two-dimensional geometry, viscosity, compressibility, and thermal conductivity of the mixture, as well as diffusion of the mixture components. **Results.** The results obtained demonstrate the transport properties of the numerical scheme. It has also been found that the equalization of the mean mixture density is accompanied by density oscillations. Time histories of the total mixture density at various points in the computational domain and two-dimensional plots of the mixture parameter distributions are presented. **Practical Relevance.** The practical significance of the study lies in identifying the properties of the numerical model relevant to the investigation of dynamic processes in homogeneous gas mixtures.

Keywords: homogeneous mixtures, Navier-Stokes equation, numerical modeling, finite difference methods

The work was carried out as part of the state assignment of the Federal Research Center of the Kazan Scientific Center of the Russian Academy of Sciences.

For citation

Tukmakov A.L., Tukmakov D.A., Akhunov A.A. Numerical Simulation of Density Equalization in a Two-Component Gas Mixture of Viscous, Compressible, Heat-Conducting Gases. *Vestnik Magnitogorskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University]. 2026, vol. 24, no. 3, pp. 171-179. <https://doi.org/10.18503/1995-2732-2026-24-3-171-179>

Введение

Одной из задач механики жидкости и газа является разработка математических моделей технологических процессов. В ряде случаев возникает необходимость исследования течений сред, представляющих собой смесь, состоящую из нескольких компонентов, в частности гомогенные смеси газов, исследованию таких течений посвящены работы [1-18]. В работе [1] моделируется смешивание газов в прямоугольных смесителях, работающих при различных числах Кнудсена и имеющих различные значения коэффициента аккомодации стенки, используется метод Монте-Карло. В статье [2] исследуется гидродинамическая неустойчивость в многокомпонентных газовых смесях, приводящая к появлению конвективных течений. В ходе исследования получены и проанализированы распределения компонентов смеси. Показано влияние исходного состава на режим течения смеси, выявлены условия, при которых молекулярная диффузия форми-

рует конвективные течения. В публикации [3] рассматриваются теоретические вопросы технологических процессов ядерной энергетики. С помощью пакетов вычислительной гидродинамики моделируются течения многокомпонентных газов и газокapельных смесей, формируемых в активной зоне ядерного реактора.

В исследовании [4] с помощью пакета вычислительной гидродинамики моделируются процессы конвективных течений и теплопередачи в смесях гелия и ксенона. В работе [5] исследовались особенности конвективного режима, возникшего за счет неустойчивости механического равновесия тройной газовой смеси гелий-аргон-азот при изотермической диффузии. Рассматривается влияние угла наклона диффузионного канала на интенсивность конвективных течений. В публикации [6] исследовалась конвективная неустойчивость в газовых смесях, формируемая за счет различия в коэффициентах диффузии компонентов смеси.

Показано, что в многокомпонентных системах, где проявляются особые диффузионные режимы, возможно возникновение немонотонных распределений. В [7] исследованы свойства вязкости, диффузии и термодиффузии газовых смесей. По методике авторов статьи, основанной на вязкости чистых газов, посчитаны термодиффузионные параметры смеси нескольких газов. В статье [8] исследован массоперенос газов через мембраны. Изучается влияние давления и температуры на коэффициенты сорбции и диффузии. Определено влияние давления и состава газовой смеси на проницаемость и селективность разделения на конкретных газовых смесях. В публикации [9] рассматриваются проблемы применения абсорбционных методов очистки газовых смесей от сернистых газов в технологиях черной металлургии.

В работе [10] разработаны подходы к формализации задачи создания ресурсосберегающих циклических установок адсорбционного разделения и очистки газовых смесей, разработан экономичный алгоритм ее решения. В статье [11] математически моделировался процесс двумерной детонации в горючей смеси в цилиндрическом канале с использованием системы уравнений газовой динамики и химической кинетики. Процесс инициирования детонации рассматривался применительно к стехиометрической водородно-воздушной смеси, находящейся при различных начальных давлениях. В работе [12] разработана квазигидродинамическая система уравнений гомогенной (с общими скоростью и температурой) многокомпонентной газовой смеси в отсутствие химических реакций с общей скоростью. В публикации [13] исследовалось влияние давления газовой смеси на фазовый состав, морфологические особенности поверхности, структурные характеристики и физико-механические свойства пленок на основе соединений алюминия с титаном и азотом, формируемых методом импульсного магнетронного распыления.

В статье [14] представлен численный алгоритм для моделирования течений нереагирующих газовых смесей в трансзвуковых режимах. Алгоритм основан на методе конечного объема, записанного для регуляризованных, или квазигазодинамических, уравнений. Уравнения для описания течения смеси выведены феноменологически на базе существующей регуляризованной системы для однокомпонентного газа и классических уравнений для газовой смеси. В работе [15] проведено исследование лазерной конверсии метановых смесей при различных условиях проведения вычислительного эксперимента. Динамика смесей описывается жесткой системой из уравнений Навье-Стокса и химической кинетики. В статье [16] исследованы процессы газодинамики, теплообмена, в особенности радиационного теплообмена, протекающих в установках вакуумного дегидрирования углеводородного сырья для многоатомных газов. Рассмотрена математическая модель процессов газодинамики, теплообмена, в особенности радиационного теплообмена. В публикации [17] численно моделировалось течение многокомпонентных газовых смесей в

рамках расширенной системы уравнений динамики невязкой среды с помощью модифицированной явной схемы типа Годунова. Особенностью используемого алгоритма является учет возможности появления сильных скачков в решениях, что выражается в использовании точных решений соответствующей задачи Римана. В монографии [18] в одномерном невязком приближении численно исследован процесс взаимодействия ударной волны, движущейся из одного газа в дисперсную взвесь, взвешенную в другом газе, при этом математическая модель не учитывала процессов диффузии.

Обзор литературы демонстрирует, что разработка математических моделей динамики газовых смесей актуальна в связи с различными практическими приложениями. При этом в ряде случаев пренебрегается моделированием газодинамических процессов [2, 5-7, 10] либо таким физическим параметром, как вязкость и теплопроводность компонентов смеси [14], или двухмерной геометрией течения [16].

В данной работе для верификации численного метода при описании конвективно-диффузионных процессов была решена задача о переходе газовой смеси в равновесное состояние при начальном неравномерном распределении одного из компонентов. Рассматривался процесс диффузии метана – одного из наиболее применяемых в энергетике газов и метантиола – одной из наиболее распространенных одоризационных примесей. Новизна работы заключается в том, что математическая модель реализует диффузионный подход газовой динамики неодородных сред [19] с учетом вязкости, сжимаемости и теплопроводности смеси, а также взаимнообратной диффузии компонент смеси.

Материалы и методы исследования

Модель процесса, применяемая в данной работе, основывается на системе уравнений движения вязкого сжимаемого теплопроводного двухкомпонентного газа, учитывающей диффузию компонентов. В работах [20-24] применялись математические модели динамики двухкомпонентного газа без учета диффузии компонентов. В статье [20] проведено сопоставление физических экспериментов с результатами численных расчетов, в публикации [23] проведено сопоставление результатов численных расчетов с аналитическими расчетами.

Система уравнений динамики двухкомпонентной среды имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_1 u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_1 v)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{12} \frac{\partial \rho_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{12} \frac{\partial \rho_1}{\partial y} \right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_2 v)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{12} \frac{\partial \rho_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{12} \frac{\partial \rho_2}{\partial y} \right), \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p - \tau_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho u v - \tau_{xy}) = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uv - \tau_{xy}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2 + p - \tau_{yy}) = 0, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(e)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left([e + p - \tau_{xx}]u - \tau_{xy}v + \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left([e + p - \tau_{yy}]v - \tau_{xy}u + \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) = 0, \end{aligned} \quad (5)$$

$$p = \rho_1 R_1 T + \rho_2 R_2 T, \quad e = \rho_1 C_{v1} T + \rho_2 C_{v2} T + 0,5 \rho (u^2 + v^2), \quad (6)$$

$$\mu = \frac{\rho_1}{\rho} \mu_1 + \frac{\rho_2}{\rho} \mu_2, \quad \lambda = \frac{\rho_1}{\rho} \lambda_1 + \frac{\rho_2}{\rho} \lambda_2.$$

$$\tau_{xx} = (\mu + \mu_T) \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} D \right),$$

$$\tau_{yy} = (\mu + \mu_T) \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} D \right),$$

$$\tau_{xy} = (\mu + \mu_T) \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad D = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}. \quad (7)$$

Здесь $R_1, \rho_1, T_1, C_{v1}, R_2, \rho_2, T_2, C_{v2}$ – газосвойства, постоянные, плотности, температуры и удельные теплоемкости газов-компонентов; $\rho = \rho_1 + \rho_2$ – плотность газовой смеси; D_{12} – коэффициент взаимной диффузии газов:

$$D_{12} = \frac{n_1 D_1 + n_2 D_2}{n_1 + n_2}, \quad (8)$$

где n_1, D_1, n_2, D_2 – концентрации и коэффициенты диффузии газа-одоранта и природного газа $D_1 = (\mu_1 + \mu_t)/\rho_1$, $D_2 = (\mu_2 + \mu_t)/\rho_2$; μ_2, μ_t – молекулярная и турбулентная динамическая вязкость компонента с наибольшей концентрацией.

Система уравнений (1)-(6) интегрировалась явным конечно-разностным методом Мак-Кормака второго порядка точности. Рассмотрим применение численного алгоритма на примере скалярного нелинейного уравнения в частных производных:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial a(f)}{\partial x} + \frac{\partial a(f)}{\partial y} = c(f). \quad (9)$$

Алгоритм явного конечно-разностного метода Мак-Кормака [25] для скалярного нелинейного уравнения (9) имеет вид

$$f_{jk}^* = f_{jk}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (a_{j+1,k}^n - a_{j,k}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (b_{j,k+1}^n - b_{j,k}^n) + \Delta t c_{jk}^n; \quad (10)$$

$$f_{jk}^{n+1} = 0,5 \left[(f_{jk}^n + f_{jk}^*) - \frac{\Delta t}{\Delta x} (a_{j,k}^* - a_{j-1,k}^*) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (b_{j,k}^* - b_{j,k-1}^*) + \Delta t c_{jk}^* \right], \quad (11)$$

где $\Delta x, \Delta y$ – шаги по пространственному направлению; Δt – шаг по времени.

В расчетах применялась схема расщепления по пространственным переменным, состоящая из одномерных операторов P_x, P_y , позволяющая построить решение на следующем временном слое [26]:

$$f_{j,k}^{n+1} = P_x \left(\frac{\Delta t_x}{2} \right) P_y \left(\frac{\Delta t_y}{2} \right) P_y \left(\frac{\Delta t_y}{2} \right) P_x \left(\frac{\Delta t_x}{2} \right) f_{j,k}^n. \quad (12)$$

Временные шаги $\Delta t_x = \Delta t_y = \Delta t$. Переход со слоя t^n на слой t^{n+1} осуществляется следующим образом [27]:

$$f_{j,k}^{(1)} = P_x \left(\frac{\Delta t_x}{2} \right) f_{j,k}^n, \quad f_{j,k}^{(2)} = P_y \left(\frac{\Delta t_y}{2} \right) f_{j,k}^{(1)},$$

$$f_{j,k}^{(3)} = P_y \left(\frac{\Delta t_y}{2} \right) f_{j,k}^{(2)}, \quad f_{j,k}^{n+1} = P_x \left(\frac{\Delta t_x}{2} \right) f_{j,k}^{(3)}.$$

В явном методе Мак-Кормака в качестве условия устойчивости рассматривается условие устойчивости типа Куранта-Фридрихса-Леви [25]:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta h^2}{4\nu + (|u| + |v|)\Delta h}, \quad \Delta h = \min(\Delta x, \Delta y),$$

$$|u| = \max |u_i|, |v| = \max |v_i|.$$

Численные осцилляции преодолевались с помощью схемы нелинейной коррекции сеточной функции [27]: если $(\delta \tilde{u}_{j-1/2} \cdot \delta \tilde{u}_{j+1/2}) < 0$ или $(\delta \tilde{u}_{j+1/2} \cdot \delta \tilde{u}_{j+3/2}) < 0$,

$f_j = \tilde{f}_j + k(\delta u_{j+1/2} - \delta u_{j-1/2})$. Используются обозначения:

$$\delta \tilde{u}_{j-1/2} = \tilde{u}_j - \tilde{u}_{j-1}, \quad \delta \tilde{u}_{j+1/2} = \tilde{u}_{j+1} - \tilde{u}_j,$$

$$\delta \tilde{u}_{j+3/2} = \tilde{u}_{j+2} - \tilde{u}_{j+1}, \quad \text{где } \tilde{u}_j \text{ – значение функции после}$$

перехода на $(n+1)$ -й временной слой по схеме Мак-Кормака, коэффициент коррекции $k = 0,125$.

В продольном направлении количество узлов расчетной области $N_x = 100$, в поперечном направлении количество узлов $N_y = 100$. Для пространственных составляющих скорости на границах задавались однородные граничные условия Дирихле, для всех остальных функций везде задавались однородные граничные условия Неймана.

Полученные результаты и их обсуждение

На рис. 1–6 представлены результаты расчетов процесса изменения плотности одного из компонентов двухкомпонентной газовой смеси при начальном неравномерном распределении его плотности в расчетной области, представляющей собой единичный квадрат ($0 < x < 1, 0 < y < 1$) (см. рис. 1).

Пусть в начальный момент времени задано неравновесное распределение плотности неподвижной газовой смеси, содержащей два газовых компонента при температуре 240 К. Первый компонент –

метантиол, теплоемкости которого $C_p=750$ Дж/кг·К, $C_v=577$ Дж/кг·К, $R=173$ Дж/кг·К, постоянная адиабаты $\gamma=1,3$. Второй компонент – метан, теплоемкости которого $C_p=2260$ Дж/кг·К, $C_v=1742$ Дж/кг·К, $R=518$ Дж/кг·К, постоянная адиабаты $\gamma=1,3$. В начальный момент времени плотность компонента 1 – метантиола – распределена по линейному закону вдоль переменной x и меняется от $\rho_1=0$ при $x=0$ до $\rho_1=2$ кг/м³ при $x=1$ (см. рис. 2).

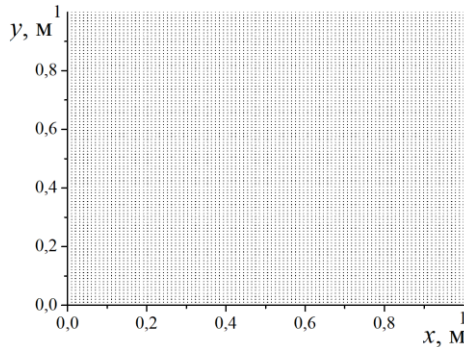


Рис. 1. Сеточное разбиение расчетной области
Fig. 1. Grid partitioning of the computational domain

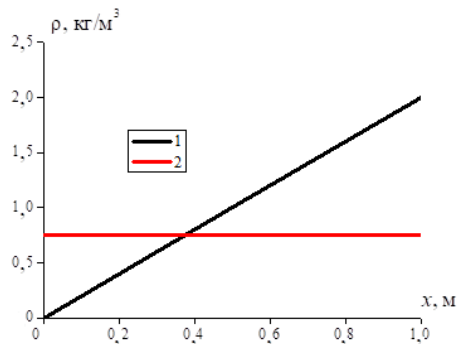


Рис. 2. Начальное пространственное распределение плотности метантиола и метана в продольном направлении – линии 1 и 2 соответственно
Fig. 2. Initial spatial distribution of methanethiol and methane densities in the longitudinal direction, curves 1 and 2, respectively

От переменной y в начальный момент времени газодинамические параметры метантиола не зависят. Начальная плотность второго компонента – метана – во всей расчетной области постоянна и равна $0,75$ кг/м³. Вследствие того, что в начальный момент времени система выведена из состояния равновесия, при $t>0$ начинается переход системы в равновесное состояние. В равновесном состоянии плотность газовой смеси должна быть равна средней по пространству в начальный момент времени: $\rho_{cp}=1,75$ кг/м³. Равновесная плотность метантиола должна в этом случае составлять 1 кг/м³.

На рис. 3 показана зависимость плотности метантиола от времени при $t>0$ в точках с координатами $x=0,01$ м, $x=0,2$ м, $x=0,8$ м, $x=0,99$ м. К моменту времени $t\approx 0,3$ с система переходит в равновесное состояние с

плотностью метантиола $\rho_1=1$ кг/м³. Процесс перехода системы в равновесное состояние включает в себя две стадии. На первой конвективной стадии выравнивание плотности происходит преимущественно за счет колебаний газа вдоль оси $0x$. Колебания происходят с частотой $\nu=156$ Гц. Эта частота приблизительно совпадает с первой собственной частотой колебаний [28] смеси вдоль оси $0x$: $\nu_{11}=c/2L=315$ (м/с)/ $2\text{м}=157,5$ Гц. Здесь $c=(\gamma RT)^{1/2}$ – скорость звука смеси, $\gamma=1,3$ – постоянная адиабаты; $R=R_1\rho_{1cp}/(\rho_{1cp}+\rho_{2cp})+R_2\rho_{2cp}/(\rho_{1cp}+\rho_{2cp})$ – газовая постоянная смеси определяется на основе аддитивного осреднения по массе компонентов; $R_1=173$ Дж/кг·К – газовая постоянная метантиола, $R_2=518$ Дж/кг·К – газовая постоянная метана; $\rho_{1cp}=1$ кг/м³ – средняя по площади плотность метантиола; $\rho_{2cp}=0,75$ кг/м³ – средняя по площади плотность метана. При температуре смеси $T=240$ К и газовой постоянной смеси $R=323$ Дж/(кг·К) скорость звука составляет 315 м/с. Первая собственная частота, полученная в численном расчете $\nu_{11}=c/2L=156$ Гц, тогда как по формуле для первой собственной частоты смеси получается $\nu_{11}=157,5$ Гц.

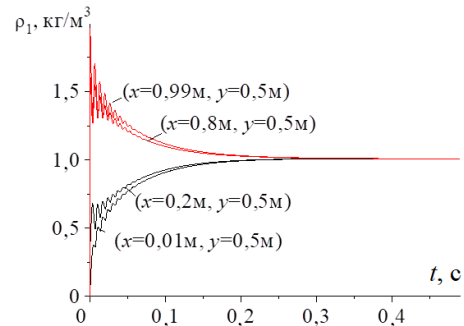


Рис. 3. Процесс выравнивания плотности метантиола в различных точках
Fig. 3. The process of equalizing the density of methanethiol at various points

Конвективная стадия перехода к равновесному состоянию оканчивается при $t\approx 0,08$ с. К этому моменту времени колебания затухают, газ можно считать неподвижным (см. рис. 4).

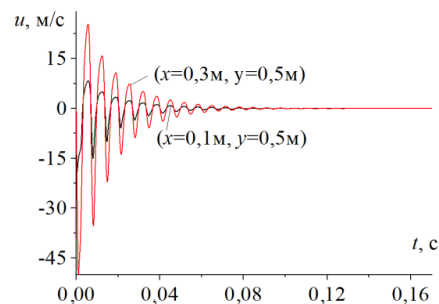


Рис. 4. Колебания скорости газа в процессе перехода к равновесному состоянию в различных точках
Fig. 4. Gas velocity oscillations during the transition to equilibrium at various points

Затем при $t > 0,08$ с начинается диффузионная стадия, оканчивающаяся при $t \approx 0,3$ с установлением равновесного состояния с постоянной плотностью компонентов и с постоянным давлением смеси (см. **рис. 5**).

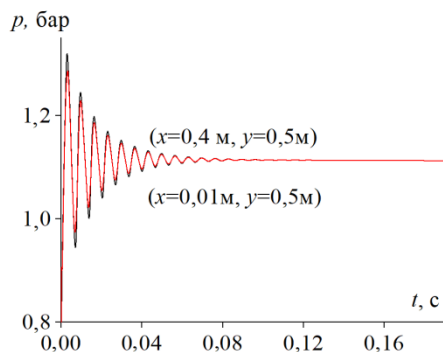


Рис. 5. Процесс установления равновесного давления
Fig. 5. Equilibrium pressure establishment

Пространственные формы колебаний давления, температуры, плотности смеси и ее компонентов в момент времени $t=0,03$ с приведены на **рис. 6, а-д**. Колебания происходят вдоль оси Ox на первой собственной частоте с узлами скорости при $x=0$ м, $x=1$ м. Соответственно, при $x=0$ м, $x=1$ м располагаются пучности стоячих волн давления, температуры и плотности.

Закключение

Таким образом, расчеты показывают, что процесс установления равновесного состояния при неравновесном начальном распределении плотности одного из компонентов протекает в две стадии – в результате процесса конвекции и последующего процесса диффузии. Конвективная стадия выравнивания плотности проис-

ходит с частотой первого линейного резонанса для смеси равновесного состава. Время ее протекания меньше, чем время протекания диффузионной стадии (см. **рис. 4, 5**), по окончании которой параметры смеси принимают равновесные значения, равные средним по пространству начальным величинам.

На основе анализа результатов расчетов можно сделать вывод о работоспособности вычислительного метода применительно к описанию конвективно-диффузионных процессов, поскольку обе стадии процесса установления равновесного состояния при начальном неравновесном распределении плотности описываются с высокой точностью. На конвективной стадии достигается высокая точность определения частоты колебаний, что свидетельствует о том, что численная схема обладает хорошими транспортными свойствами, и при моделировании распространения возмущений скорость звука определяется с высокой точностью. Следствием работы схемы на диффузионной стадии является переход к установившимся параметрам, которые также с высокой точностью совпадают с равновесными.

Результаты расчетов могут быть применены при моделировании процессов одоризации газов.

Список источников

1. Sabouri M., Roohi E. Inversion in binary gas mixtures in rarefied flow conditions: Direct simulation Monte Carlo solution and comparison with the analytical solutions at free molecular regime // *Physics of Fluids*. 2023, vol. 35, no. 7.
2. Мухамбетова А., Косов В.Н. Особенности многокомпонентного изотермического смешения газовых смесей на границе «диффузия-конвекция» // *Universum: технические науки*. 2022. № 5-8. С. 27-30.

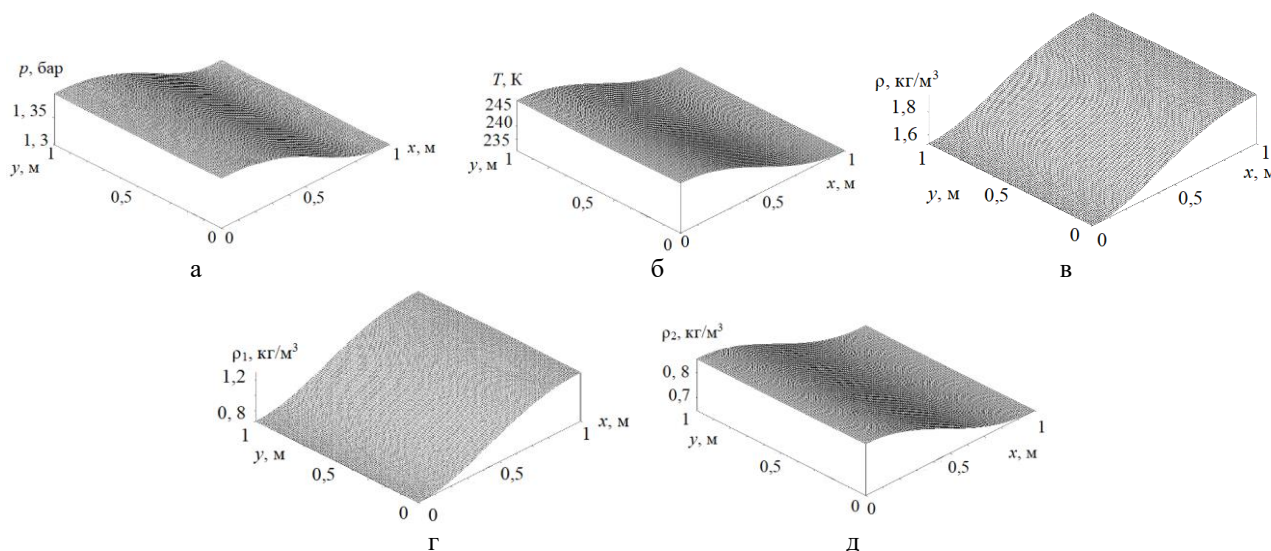


Рис. 6. Поля газодинамических функций двухкомпонентной газовой смеси в момент времени $t=0,03$ с:

а – давление; б – температура; в – плотность смеси; г – плотность метантиола; д – плотность метана

Fig. 6. Fields of gas-dynamic variables of the two-component gas mixture at time $t = 0.03$ s: а is pressure; б is temperature; в is mixture density; г is methanethiol density; д is methane density

3. Bhowmik P.K., Schlegel J.P. Multicomponent gas mixture parametric CFD study of condensation heat transfer in small modular reactor system safety // *Experimental and Computational Multiphase Flow*. 2023, vol. 5, no. 1, pp. 15-28.
4. Zhou B., Sun J., Sun Y. Investigation on Laminar Flow and Heat Transfer of Helium–Xenon Gas Mixtures with Variable Properties // *Energies*. 2023, vol. 16, no. 4
5. Влияние угла наклона канала на конвективное смешение, вызванное неустойчивостью механического равновесия тройной газовой смеси при изотермической диффузии / Асембаева М.К., Косов В.Н., Красиков С.А., Федоренко О.В. // *Письма в Журнал технической физики*. 2019. Т. 45. № 21. С. 7-10.
6. Косов В.Н., Мукамеденкызы В., Федоренко О.В. Некоторые особенности смешения тройных газовых смесей на границе смены режимов «диффузия - концентрационная гравитационная конвекция» в квазистационарных условиях // *Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Естественные науки*. 2018. № 2. С. 125-133.
7. Расчет термодиффузионных характеристик газов в рамках кинетических теорий разреженные газы / Богатырев А.Ф., Макеенкова О.А., Кучеренко М.А., Григорьев Е.Б. // *Научно-технический сборник «Вести газовой науки»*. 2021. № 4. С. 110-118.
8. Каграманов Г.Г., Гуркин В.Н., Фарносова Е.Н. Влияние растворимости газов на эффективность мембранных процессов, на примере разделения смесей He/CH_4 и CO_2/CH_4 // *Мембраны и мембранные технологии*. 2020. Т. 10. № 4. С. 249-256.
9. Черчинцев В.Д., Савина Ю.Е. Совершенствование абсорбционных процессов улавливания диоксида серы из газов агломерационного производства // *Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова*. 2012. № 1. С. 21-23.
10. Методология создания ресурсосберегающих циклических установок адсорбционного разделения и очистки газовых смесей / Акулинин Е.И., Голубятников О.О., Дворецкий Д.С., Дворецкий С.И. // *Математические методы в технологиях и технике*. 2021. № 1. С. 15-19.
11. Условия инициирования детонации в стехиометрической водородно-воздушной смеси стримерным разрядом / Булат П.В., Волков К.Н., Грачев Л.П., Есаков И.И., Раваев А.А. // *Инженерно-физический журнал*. 2023. Т. 96. № 6. С. 1481-1486.
12. Злотник А.А., Федченко А.С. О свойствах квазигазодинамической системы уравнений гомогенной газовой смеси с общей регуляризующей скоростью // *Дифференциальные уравнения*. 2022. Т. 58. № 3. С. 346-360.
13. Каменева А.Л., Сошина Т.О. Физико-механические свойства пленок на основе Ti-Al-N, формируемых импульсным магнетронным распылением при переменном давлении газовой смеси // *Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова*. 2013. № 4 (44). С. 60-64.
14. Елизарова Т.Г., Шильников Е.В. Численное моделирование газовых смесей в рамках квазигазодинамического подхода на примере взаимодействия ударной волны с пузырьком газа // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2021. Т. 61. № 1. С. 124-135.
15. Пескова Е.Е., Снытников В.Н. Численное исследование конверсии метановых смесей под воздействием лазерного излучения // *Журнал Средневолжского математического общества*. 2023. Т. 25. № 3. С. 159-173.
16. Назаров А.А., Поникаров С.И. Апробация математической модели радиационного теплообмена многоатомных газов в установках вакуумного дегидрирования углеводородов // *Теоретические основы химической технологии*. 2020. Т. 54. № 4. С. 480-495.
17. Борисов В.Е., Рыков Ю.Г. Моделирование течений многокомпонентных газовых смесей с использованием метода двойного потока // *Математическое моделирование*. 2020. Т. 32. № 10. С. 3-20.
18. Кутушев А.Г. Математическое моделирование волновых процессов в аэродисперсных и порошкообразных средах. Санкт-Петербург: Недра, 2003. 284 с.
19. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978. 336 с.
20. Нигматулин Р.И., Губайдуллин Д.А., Тукмаков Д.А. Ударно-волновой разлет газовзвесей // *Доклады Академии наук*. 2016. Т. 466. № 4. С. 418-421.
21. Тукмаков Д.А. Численное моделирование движения и отражения ударных волн высокой интенсивности в неоднородной среде // *Физика и техника высоких давлений*. 2019. Т. 29. № 4. С. 18-26.
22. Тукмаков Д.А. Численное исследование влияния свойств газовой составляющей взвеси твердых частиц на разлет сжатого объема газовзвеси в двухкомпонентной среде // *Инженерно-физический журнал*. 2020. Т. 93. № 2. С. 304-310.
23. Тукмаков Д.А. Численное исследование интенсивных ударных волн в запыленных средах с однородной и двухкомпонентной несущей фазой // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2020. Т. 12. № 1. С. 141-154.
24. Тукмаков Д.А. Конечно-разностная модель динамики гомогенной смеси в применении к исследованию распространения и отражения ударной волны большой интенсивности в водородно-воздушной среде // *Модели, системы, сети в экономике, технике, природе и обществе*. 2020. № 1. С. 86-97.
25. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. Т. 2. М.: Мир, 1991. 551 с.
26. Ковеня В.М., Тарнавский Г.А., Черный С.Г. Применение метода расщепления в задачах аэродинамики. Новосибирск: Наука, 1990. 247 с.
27. Музафаров И.Ф., Утюжников С.В. Применение компактных разностных схем к исследованию нестационарных течений сжимаемого газа // *Математическое моделирование*. 1993. №3. С.74-83.
28. Красильников В.А., Крылов В.В. Введение в физическую акустику. М.: Наука, 1984. 403 с.

References

1. Sabouri M., Roohi E. Inversion in binary gas mixtures in rarefied flow conditions: Direct simulation Monte Carlo solution and comparison with the analytical solutions at free molecular regime. *Physics of Fluids*. 2023;35(7).
2. Mukhambetova A., Kosov V.N. Features of multicomponent isothermal mixing of gas mixtures at the diffusion-convection boundary. *Universum: Tekhnicheskie nauki* [Universum: Technical Sciences]. 2022;(5-8):27-30. (In Russ.)

3. Bhowmik P.K., Schlegel J.P. Multicomponent gas mixture parametric CFD study of condensation heat transfer in small modular reactor system safety. *Experimental and Computational Multiphase Flow*. 2023;5(1):15-28.
4. Zhou B., Sun J., Sun Y. Investigation on laminar flow and heat transfer of helium-xenon gas mixtures with variable properties. *Energies*. 2023;16(4).
5. Asembaeva M.K., Kosov V.N., Krasikov S.A., Fedorenko O.V. Effect of channel inclination angle on convective mixing caused by mechanical equilibrium instability of a ternary gas mixture during isothermal diffusion. *Pisma v Zhurnal tekhnicheskoy fiziki* [Technical Physics Letters]. 2019;45(21):7-10. (In Russ.)
6. Kosov V.N., Mukamedenkyzy V., Fedorenko O.V. Some features of mixing of ternary gas mixtures at the boundary of transition between diffusion and concentration-driven gravitational convection regimes under quasi-stationary conditions. *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Estestvennye nauki* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Natural Sciences]. 2018;(2):125-133. (In Russ.)
7. Bogatyrev A.F., Makeenkova O.A., Kucherenko M.A., Grigoriev E.B. Calculation of thermodiffusion characteristics of gases within the framework of kinetic theories of rarefied gases. *Nauchno-tekhnicheskii sbornik Vesti gazovoy nauki* [Scientific and Technical Collection News of Gas Science]. 2021;(4):110-118. (In Russ.)
8. Kagramanov G.G., Gurkin V.N., Famosova E.N. Effect of gas solubility on the efficiency of membrane processes: A case study of He/CH₄ and CO₂/CH₄ mixture separation. *Membrany i membrannye tekhnologii* [Membranes and Membrane Technologies]. 2020;10(4):249-256. (In Russ.)
9. Cherkintsev V.D., Savina Yu.E. Improvement of absorption processes for capturing sulfur dioxide from sintering plant gases. *Vestnik Magnitogorskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University]. 2012;(1):21-23. (In Russ.)
10. Akulinin E.I., Golubyatnikov O.O., Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I. Methodology for creating resource-saving cyclic adsorption units for separation and purification of gas mixtures. *Matematicheskie metody v tekhnologiyakh i tekhnike* [Mathematical Methods in Technology and Engineering]. 2021;(1):15-19. (In Russ.)
11. Bulat P.V., Volkov K.N., Grachev L.P., Esakov I.I., Ravaev A.A. Conditions for initiation of detonation in a stoichiometric hydrogen-air mixture by a streamer discharge. *Inzhenerno-fizicheskiy zhurnal* [Journal of Engineering Physics]. 2023;96(6):1481-1486. (In Russ.)
12. Zlotnik A.A., Fedchenko A.S. On the properties of a quasi-gasdynamic system of equations for a homogeneous gas mixture with a common regularizing velocity. *Differentsialnye uravneniya* [Differential Equations]. 2022;58(3):346-360. (In Russ.)
13. Kameneva A.L., Soshina T.O. Physical and mechanical properties of Ti-Al-N-based films formed by pulsed magnetron sputtering at variable gas mixture pressure. *Vestnik Magnitogorskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. G.I. Nosova* [Vestnik of Nosov Magnitogorsk State Technical University]. 2013;(44):60-64. (In Russ.)
14. Elizarova T.G., Shilnikov E.V. Numerical simulation of gas mixtures within the quasi-gasdynamic approach: A case study of shock wave interaction with a gas bubble. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki* [Computational Mathematics and Mathematical Physics]. 2021;61(1):124-135. (In Russ.)
15. Peskova E.E., Snytnikov V.N. Numerical study of the conversion of methane mixtures under laser irradiation. *Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva* [Journal of the Middle Volga Mathematical Society]. 2023;25(3):159-173. (In Russ.)
16. Nazarov A.A., Ponikarov S.I. Testing of a mathematical model of radiative heat transfer in polyatomic gases in vacuum hydrocarbon dehydrogenation units. *Teoreticheskie osnovy khimicheskoy tekhnologii* [Theoretical Foundations of Chemical Engineering]. 2020;54(4):480-495. (In Russ.)
17. Borisov V.E., Rykov Yu.G. Modeling of multicomponent gas mixture flows using the double-flux method. *Matematicheskoe modelirovanie* [Mathematical Modeling]. 2020;32(10):3-20. (In Russ.)
18. Kutushev A.G. *Matematicheskoe modelirovanie volnovykh protsessov v aerodispersnykh i poroshkoobraznykh sredakh* [Mathematical modeling of wave processes in aerodisperse and powder media]. Saint Petersburg: Nedra, 2003, 284 p. (In Russ.)
19. Nigmatulin R.I. *Osnovy mekhaniki geterogennykh sred* [Fundamentals of mechanics of heterogeneous media]. Moscow: Nauka, 1978, 336 p. (In Russ.)
20. Nigmatulin R.I., Gubaydullin D.A., Tukmakov D.A. Shock-wave expansion of gas-particle mixtures. *Doklady Akademii nauk* [Reports of the Academy of Sciences]. 2016;466(4):418-421. (In Russ.)
21. Tukmakov D.A. Numerical simulation of the motion and reflection of high-intensity shock waves in a heterogeneous medium. *Fizika i tekhnika vysokikh davleniy* [Physics and Technology of High Pressures]. 2019;29(4):18-26. (In Russ.)
22. Tukmakov D.A. Numerical study of the effect of gas-phase properties of a solid-particle suspension on the expansion of a compressed volume of a gas-particle mixture in a two-component medium. *Inzhenerno-fizicheskiy zhurnal* [Journal of Engineering Physics]. 2020;93(2):304-310. (In Russ.)
23. Tukmakov D.A. Numerical study of intense shock waves in dusty media with homogeneous and two-component carrier phases. *Kompyuternye issledovaniya i modelirovanie* [Computer Research and Modeling]. 2020;12(1):141-154. (In Russ.)
24. Tukmakov D.A. Finite-difference model of homogeneous mixture dynamics applied to the study of propagation and reflection of a high-intensity shock wave in a hydrogen-air medium. *Modeli, sistemy, seti v ekonomike, tekhnike, prirode i obshchestve* [Models, Systems, Networks in Economics, Technology, Nature and Society]. 2020;(1):86-97. (In Russ.)
25. Fletcher C. *Vychislitel'nye metody v dinamike zhidkostey* [Computational Techniques for Fluid Dynamics]. Moscow: Mir, 1991, 551 p. (In Russ.)
26. Kovenya V.M., Tamavskiy G.A., Chernyy S.G. *Primenenie metoda rasshchepeniya v zadachakh aerodinamiki* [Application of the splitting method to problems of aerodynamics]. Novosibirsk: Nauka, 1990, 247 p. (In Russ.)

27. Muzafarov I.F., Utyuzhnikov S.V. Application of compact finite-difference schemes to the study of unsteady compressible gas flows. *Matematicheskoe modelirovanie* [Mathematical Modeling]. 1993;(3):74-83. (In Russ.)
28. Krasilnikov V.A., Krylov V.V. *Vvedenie v fizicheskuyu akustiku* [Introduction to physical acoustics]. Moscow: Nauka, 1984, 403 p. (In Russ.)

Поступила 29.12.2025; принята к публикации 04.09.2026; опубликована 30.09.2026
Submitted 29/12/2025; revised 04/09/2026; published 30/09/2026

Тукмаков Алексей Львович – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Институт механики и машиностроения Казанского научного центра Российской академии наук, Казань, Россия.
Email: altukmakov@kai.ru

Тукмаков Дмитрий Алексеевич – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт механики и машиностроения Казанского научного центра Российской академии наук, Казань, Россия.
Email: tukmakovda@imm.knc.ru. ORCID 0000-0002-0335-8548

Ахунов Адель Айратович – научный сотрудник, Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия.
Email: white-bars95@yandex.ru

Alexey L. Tukmakov – DrSc (Eng.), Leading Researcher, IME Kazan Scientific Center of the Russian Academy of Sciences, Kazan, Russia.
Email: altukmakov@kai.ru

Dmitry A. Tukmakov – PhD (Eng.), Senior Researcher, IME Kazan Scientific Center of the Russian Academy of Sciences, Kazan, Russia.
Email: tukmakovda@imm.knc.ru. ORCID 0000-0002-0335-8548

Adel A. Akhunov – Researcher, Kazan National Research Technical University, Kazan, Russia.
Email: white-bars95@yandex.ru