

На правах рукописи



Уточкин Владимир Юрьевич

**ХЕМОКОНВЕКЦИЯ В ЯЧЕЙКЕ ХЕЛЕ-ШОУ
В ПОСТОЯННОМ И ПЕРЕМЕННОМ ИНЕРЦИОННОМ ПОЛЕ**

1.1.9 – Механика жидкости, газа и плазмы

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Пермь – 2025

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» (ПНИПУ).

Научный руководитель: **Брацун Дмитрий Анатольевич**, доктор физико-математических наук, доцент.

Официальные оппоненты: **Бекежанова Виктория Бахытовна**, доктор физико-математических наук, заведующий отделом дифференциальных уравнений механики Института вычислительного моделирования СО РАН – обособленного подразделения ФГБУН ФИЦ "Красноярский научный центр СО РАН", г. Красноярск;

Субботин Станислав Валерьевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики и технологии ФГБОУ ВО "Пермский государственный гуманитарно-педагогический университет" (г. Пермь).

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки "Институт гидродинамики им. М.А.Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук", г. Новосибирск.

Защита состоится **30 сентября 2025 г.** в 14:00 часов на заседании диссертационного совета Д 004.036.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки "Пермский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук" (филиал – Институт механики сплошных сред УрО РАН) по адресу: 614018, г. Пермь, ул. Академика Королёва, 1; тел: (342) 237-84-61; факс: (342) 237-84-87; сайт: www.icmm.ru.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Института механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук.

Автореферат разослан « ____ » августа 2025 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук, доцент

 / А.Л. Зуев

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Исследование взаимосвязи химических реакций и конвективного движения жидкости мотивируется двумя глобальными причинами. Первой причиной служит бурное развитие представлений о структурообразовании в сложных нелинейных системах, начавшееся в середине прошлого столетия. В пространственно распределенных средах выше порога устойчивости, как правило, наблюдается нарушение симметрии основного состояния, сопровождающееся всё более сложным поведением. Хорошо известно, что в этой области существует несколько фундаментальных проблем: отбор волновых чисел, явление гистерезиса, поиск универсальных сценариев перехода к хаосу. Наглядным примером сложного пространственно-временного поведения сплошной среды служит конвективное движение жидкости. Стандартное описание конвективных явлений в рамках полевой теории требует рассмотрения взаимодействия двух полей: одно из них — скоростное (векторное), а второе — тепловое (скалярное). Как известно, поле температуры играет принципиальную роль в возникновении тепловой конвекции, так как именно его неоднородности приводят к вариациям плотности и развитию неустойчивости жидкости. Специфика хемоконвективных систем заключается в том, что дополнительные скалярные поля, описывающие концентрации растворенных веществ, вступающих в реакцию, принципиально отличаются от поля температуры. Неустойчивость, генерируемая теплом, как правило, имеет глобальный для данной системы характер. В классических задачах конвекции тепло поступает в систему либо при нагреве со стороны границ, либо в процессах тепловыделения/телопоглощения в среде. В последнем случае постулируются универсальные правила для всей среды сразу, что также делает эффект глобальным для системы. Химические реакции подразумевают наличие сразу нескольких скалярных полей, которые непрерывно испытывают локальные превращения, что непосредственно влияет на локальное значение плотности. Важно отметить, что возмущения концентрационных полей являются долгоживущими на фоне вариаций теплового поля, так как типичное значение числа Льюиса для жидкостей $\sim 10^2$ (диффузия тепла происходит на два порядка быстрее диффузии вещества). Поэтому локальные тепловые возмущения, которые всегда сопровождают экзо- и эндотермические реакции, не могут конкурировать с возмущениями концентраций. Все перечисленное указывает на то, что химические реакции открывают для исследуемой системы новые степени свободы, которые могут привести к еще неизвестным эффектам в теории конвективной устойчивости. Вторую важную мотивацию обеспечивают технологические приложения. Вопрос о возбуждении или подавлении движения жидкости в реагирующей среде в промышленных условиях представляет собой

комплексную задачу исследования множества возникающих природных процессов. Например, химические реакции могут сопровождаться изменениями исходных физических свойств жидкости. Локально воздействуя на концентрационные и температурные поля, реакция способна инициировать макроскопическое движение и осложнять его динамику более тонкими эффектами, связанными с зависимостью диффузии компонентов от концентрации, вязкостью растворителя, вариациями коэффициента поверхностного натяжения. В свою очередь течение жидкости может существенно изменять скорость реакции за счет перемешивания реагентов. Область применения данных эффектов включает процессы хемосорбции при захвате CO_2 , нефтепереработку, сепарацию руд. В качестве отдельной перспективной отрасли выделяются химические микрореакторы проточного типа, где отыскание оптимального способа перемешивания реагирующих компонентов является ключевой проблемой.

Зачастую в таких устройствах используется квазидвумерная конфигурация Хеле-Шоу, что объясняется удобством регистрации тепловых и концентрационных полей интерферометрическими методами. Теоретическое описание течения также существенно упрощается в приближении Хеле-Шоу за счет исключения одной из пространственных координат. Однако даже в этом случае система в условиях протекания химических реакций может иметь обширный диапазон сценариев эволюции. При наличии макроскопического движения всегда существует характерный пространственный масштаб, который определяется вязкой диссипацией. В многокомпонентных средах образование пространственных структур происходит с участием механизма диффузии. Конечное расстояние, на которое молекулы могут диффундировать прежде чем вступят в реакцию, также навязывает системе характерный пространственный масштаб, который определяется кинетикой реакции. Различия соответствующих масштабов могут приводить к таким нетривиальным эффектам, как формирование зон с локально неустойчивой стратификацией по плотности. Таким образом, дополнительный источник энергии в виде химической реакции расширяет спектр возможных типов поведения и увеличивает число управляющих параметров системы.

Многообразие наблюдаемых явлений зачастую не допускает описания в рамках единого подхода и требует разработки конкретных моделей в зависимости от типа реакции и условий ее протекания в жидкой среде. В исследованиях хемоконвективных течений Хеле-Шоу особую роль играют двухслойные системы, в которых процессы реакции-диффузии-конвекции сильно отличаются по характеру в случае смешивающихся и несмешивающихся растворов. Несмотря на то, что данная конфигурация широко освещена в литературе, классификация возможных типов неустойчивости не является исчерпывающей и до сих пор пополняется режимами, теоретическое объяснение которых опирается

на свойства конкретных реагентов. Зачастую такое объяснение позволяет не только выявить особенности динамики рассматриваемого режима, но и расширить общие представления о структурообразовании в гидродинамических системах. Наконец, стоит отметить, что значительное число работ по двухслойным системам реагирующих жидкостей посвящено рассмотрению неустойчивости в статическом поле тяжести. Это можно объяснить удобством проведения лабораторного эксперимента и простотой численного моделирования, однако с точки зрения приложений более перспективным является переменное инерционное поле. В частности, поле центробежной силы меняется с расстоянием до оси вращения и может непосредственно контролироваться величиной угловой скорости, что увеличивает число степеней свободы системы и позволяет эффективно управлять течением. К настоящему времени подобные исследования слабо представлены в литературе. С учетом наметившейся в химической промышленности тенденции к активному управлению, последнее обстоятельство также подчеркивает актуальность диссертационного исследования.

Целью работы является исследование конвективной неустойчивости, вызванной протеканием химической реакции в системе растворов, помещенных в ячейку Хеле-Шоу и находящихся под воздействием различных силовых полей. Для достижения цели были решены следующие **задачи**:

1. Исследована устойчивость, структура и эволюция конвективных движений в системе несмешивающихся реагирующих растворов, помещенных в вертикально-ориентированную ячейку Хеле-Шоу в поле тяжести.
2. Исследовано влияние силы Кориолиса на структуру и устойчивость течения в жидкости при протекании реакции нулевого порядка в ячейке Хеле-Шоу.
3. Исследована устойчивость, структура и эволюция конвективных движений, вызванных реакцией нейтрализации второго порядка в смеси, помещенной в ячейку Хеле-Шоу в поле центробежной силы.

Научная новизна:

1. В задаче о движении растворов с межфазной границей в поле тяжести применяется новый подход, основанный на учете производства растворителя в реакционной зоне.
2. В рамках данного подхода описан режим конвективной неустойчивости, демонстрирующий тенденцию к пространственной локализации последовательности вихревых структур с растущим аспектным отношением.
3. Показано, что корректный вывод уравнения движения в приближениях Хеле-Шоу и Буссинеска приводит к появлению слагаемого, отвечающего за плавучесть элемента среды, вызываемой силой Кориолиса.

4. В рамках изучения эффекта плавучести Кориолиса решена задача о конвективной устойчивости жидкости с внутренней генерацией компонента переноса во вращающейся ячейке Хеле-Шоу.

5. Исследованы режимы конвекции при центрифугировании реагирующих растворов с концентрационно-зависимыми законами диффузии; выявлены условия существования режимов в зависимости от начальных концентраций, величины перегрузки и расстояния от поверхности их контакта до оси вращения.

Теоретическая и практическая значимость работы. Часть полученных результатов имеет общетеоретический интерес, позволяя углубить представления об особенностях формирования течений в системах реагирующих жидкостей. К ним можно отнести модель производства растворителя, позволившую объяснить локализацию конвективной структуры в пространстве, а также эффект плавучести Кориолиса в двумерных течениях. С практической точки зрения результаты исследования режимов неустойчивости реагирующих жидкостей во вращающейся ячейке Хеле-Шоу могут быть использованы в технологиях центрифугирования растворов драгоценных металлов, а также в ряде биомедицинских устройств на основе вращающихся платформ, применяющихся в том числе для транспорта питательных веществ к клеточным культурам. В более широком смысле исследования тепло- и массообмена в течениях Хеле-Шоу актуальны для тех отраслей химической промышленности, где требуется тщательный контроль движения растворов на малых пространственных масштабах: в микросмесителях, реакторах проточного типа.

Методология и методы исследования. В условиях протекания реакции второго порядка основное состояние реакция-диффузия необратимо меняется во времени, что вызывает необходимость использования прямого численного моделирования. В указанном случае задача о движении жидкости решалась методом конечных разностей. Устойчивость и свойства инкрементов возмущений основного состояния системы в условиях генерации единственного компонента переноса исследовались методами линейного анализа. Ветвление решений вблизи первой бифуркации равновесия изучалось методом многих временных масштабов. Для обработки пространственных и временных характеристик течений применялось разложение Фурье. В задаче о конвекции в плоской кювете анализ эволюции течений проводился с использованием пространственно-временных диаграмм.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Установлен механизм динамической стабилизации хемоконвективной структуры в системе несмешивающихся реагирующих растворов кислоты и основания. Регулярность паттерна обеспечивается производством растворителя в ходе реакции. Получены уравнения, описывающие данный эффект. При

определенных значениях управляющих параметров регулярная структура сменяется неупорядоченной конвекцией.

2. Установлена роль силы Кориолиса в квазидвумерных течениях вращающейся неоднородной жидкости в геометрии Хеле-Шоу. Получена система уравнений конвекции с эффектом плавучести Кориолиса, который срабатывает при наличии неоднородности плотности в среде. Под действием эффекта равновесие жидкости стабилизируется, а переход к хаотической конвекции осложняется бифуркациями тороидальных аттракторов.

3. Выявлены сценарии развития неустойчивости в системе смешивающихся реагирующих растворов во вращающейся ячейке Хеле-Шоу. Взаимодействие реакции и диффузии приводит к возникновению потенциальных ям в поле плотности среды. Под действием вращения в них возбуждается неустойчивость в виде регулярной системы ячеек. При определенном соотношении концентраций реагентов ячеистая конвекция сменяется плотностной волной ударного типа.

Достоверность обеспечивается обоснованностью физических представлений, лежащих в основе предлагаемых моделей, использованием апробированных методов расчета и анализа результатов, сравнением с экспериментальными данными.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы были представлены на следующих научных конференциях: VI, VII, VIII, IX Всероссийские конференции «Пермские гидродинамические научные чтения» (Пермь, 2019, 2020, 2022, 2023); XXII, XXIII, XXIV Зимние школы по механике сплошных сред (Пермь, 2021, 2023, 2025), 12-ая, 13-ая, 14-ая Международные конференции «Волны и вихри в сложных средах» (Москва, 2021, 2022, 2023), XXIV, XXV Международные конференции «Нелинейные задачи теории гидродинамической устойчивости и турбулентность» (Звенигород, 2020, 2024), XI, XII, XIII Всероссийские конференции «Актуальные проблемы прикладной математики и механики» (п. Джанхот, Краснодарский край, 2022, 2023, 2024), Международный симпозиум «Неравновесные процессы в сплошных средах» (Пермь, 2024), Всероссийская конференция «Математическое моделирование в механике» (Красноярск, 2024), XXIX Всероссийская конференция «Математическое моделирование в естественных науках» (Пермь, 2020), VI Всероссийская конференция «Теплофизика и физическая гидродинамика» (Севастополь, 2021), XIII Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике (Санкт-Петербург, 2023), Минисимпозиум «Задачи механики деформируемых сред с поверхностями раздела» (Красноярск, 2022).

Результаты были представлены на Пермском гидродинамическом семинаре им. Г. З. Гершуни, Е. М. Жуховицкого и Д. В. Любимова (заседания

№1578 (2023), №1597 (2025), Пермский государственный университет, рук. проф. Т. П. Любимова).

Часть исследований выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 19-11-00133) и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FSNM-2023-0003).

Личный вклад. Аналитические вычисления и численное моделирование выполнены автором самостоятельно. Постановка задач, обсуждение и интерпретация результатов проведены совместно с научным руководителем и соавторами.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 29 работ, включая 8 статей в журналах, рекомендованных ВАК.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 3 глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 140 страниц, включая 57 рисунков и 3 таблицы. Список литературы содержит 178 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность и новизна исследований, проводимых в рамках диссертационной работы, сформулированы ее цель и задачи, отражена теоретическая и практическая значимость результатов, представлены положения, выносимые на защиту.

В **первой главе** выполнен обзор литературы, посвященной исследованиям хемотрективной неустойчивости. Отмечается, что в ряду химических реакций выделяется реакция нейтрализации кислоты основанием с нелинейной кинетикой, которая выражается схемой



где A , B и S обозначают кислоту, основание и соль, Q — количество тепла. Данная реакция является одной из самых быстрых, вследствие чего имеет фронтальный характер. При исследовании конвективного движения в условиях нейтрализации реагентов используется ячейка Хеле-Шоу, в которой растворы размещаются в виде двухслойной системы. В зависимости от способности слоев к смешению динамика системы может различаться, однако ее характерной чертой как для смешивающихся, так и для несмешивающихся растворов является нерегулярная картина течения по обе стороны реакционного фронта. Тем не менее, в ряде экспериментов система демонстрировала тенденцию к упорядочению, что не имело объяснения в рамках существующих теоретических моделей.

Большая часть исследований в области хемотрекции выполнялась в условиях статического поля тяжести. Однако с точки зрения приложений больший интерес представляет вращающаяся конфигурация, где интенсив-

ность силового воздействия может контролироваться в эксперименте. Чаще всего конвекция в условиях вращения изучалась в связи с динамикой атмосферы и океана. Задача о движении реагирующих растворов во вращающейся ячейке Хеле-Шоу имеет ряд отличий от задач геофизики, что вызывает необходимость формулировки уравнений хемоконвекции в приближении тонкого вращающегося слоя.

Вторая глава посвящена исследованию режимов конвективной неустойчивости в системе реагирующих жидкостей в ячейке Хеле-Шоу в поле тяжести [1–3]. Верхний слой заполняется раствором соляной кислоты HCl в пентаноле, нижний — водным раствором гидроксида натрия NaOH . Молекулы кислоты могут преодолевать межфазную границу и диффундировать в нижний слой. Встречный поток щелочи отсутствует, поэтому реакция нейтрализации

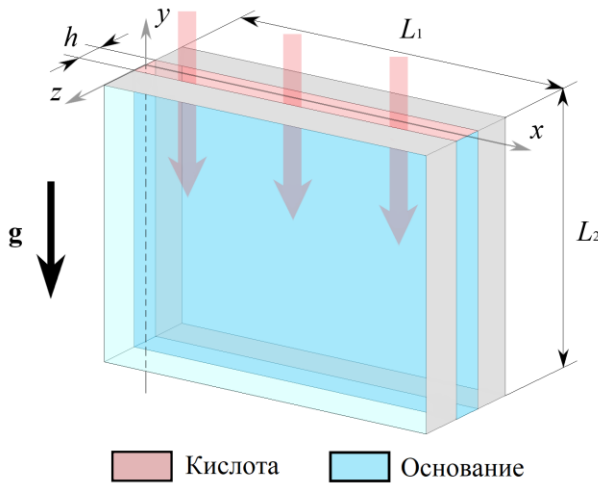


Рисунок 1. Ячейка Хеле-Шоу в поле тяжести.

протекает только в водной фазе. Поскольку пластины ячейки Хеле-Шоу обеспечивают быстрый теплоотвод из реакционной зоны, в схеме (1) предполагается, что $Q = 0$. Верхний слой выполняет роль пассивного резервуара с кислотой, и система редуцируется до одного слоя, заполненного раствором основания с концентрацией B_0 . На верхней свободной границе задается фиксированное значение A_0 концентрации кислоты. Система эволюционных уравнений

включает уравнения движения в приближениях Буссинеска и Хеле-Шоу и уравнения переноса компонентов A , B и S . Развивается подход, в котором учитывается динамическое производство растворителя в ходе реакции. Вводится объем $V_{rz}(t)$ зоны реакции и ее расширение ΔV за счет образования воды. Их величины рассчитываются согласно кинетике реакции, после чего поправка

$$W(t) = \frac{1}{1 + \frac{\Delta V(t)}{V_{rz}(t)}}, \quad (2)$$

вносится в безразмерную добавочную плотность раствора

$$\hat{\rho} = A + R_B B + R_S W(t) S, \quad (3)$$

где $R_B = \beta_B / \beta_A$ и $R_S = \beta_S / \beta_A$ — отношения коэффициентов объемного расширения компонентов. Величина $\Delta V / V_{rz}(t)$ пропорциональна безразмерному комплексу

$$G = A_0 \left(\frac{\mu_{\text{H}_2\text{O}}}{\rho_{\text{H}_2\text{O}}} + \frac{\mu_s}{\rho_s} \right), \quad (4)$$

где μ — молярная масса, ρ — плотность вещества. Параметр G определяет вклад образования воды в реакционном процессе с фиксированной парой реагентов. Управляющим параметром задачи служит отношение начальных концентраций $\gamma = B_0 / A_0$.

В разделе 2.1 рассматривается динамика системы при изменении отношения начальных концентраций [1]. На параметрической прямой выделяется четыре диапазона, соответствующих различным сценариям неустойчивости (Рис. 2). При $\gamma \rightarrow 0$ жидкость вблизи границы раздела оказывается плотнее нижнего слоя, что приводит к неустойчивости Рэлея – Тейлора (RT). В противоположном пределе $\gamma \gg 1$ стратификация по плотности является устойчивой, и в зоне реакции формируется диффузионный слой (DL). Случай $\gamma \approx 1$ отвечает балансу между скоростями реакции и диффузии, что приводит к установлению квазистационарных процессов переноса. В этом случае профиль плотности имеет потенциальную яму из двух частей: нижняя с устойчивой стратификацией, верхняя — с неустойчивой.

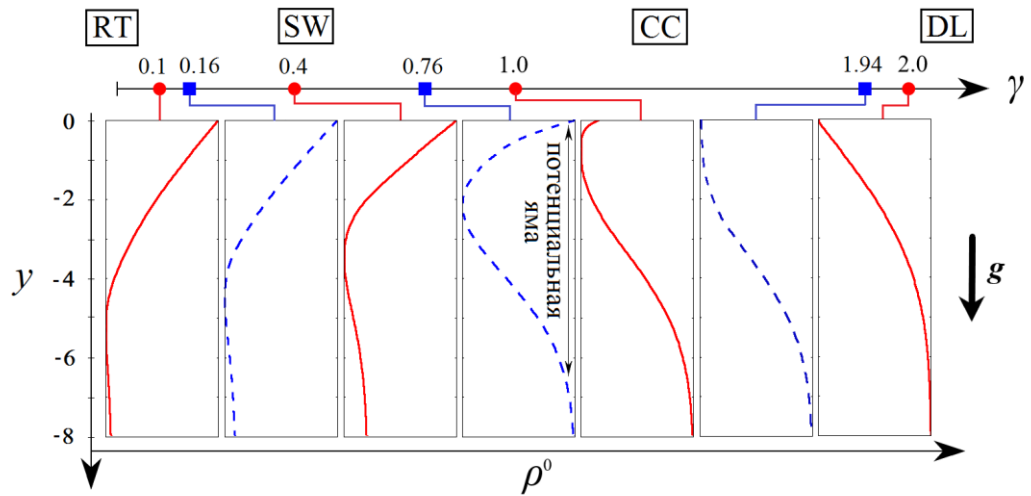


Рисунок 2. Профили плотности в основном состоянии $\rho^0(y)$.

Условие развития локализованной конвекции состоит в том, что плотность нижней части превышает плотность верхней. Их равенство определяет точку бифуркации, разделяющую локализованную ячейистую конвекцию (CC) и глобальную неустойчивость (RT). Переход между режимами осуществляется при $\gamma_2 = 0.76$. Еще одна бифуркация происходит при $\gamma_3 = 1.94$, когда минимум профиля совпадает с координатой свободной поверхности и возмущения Рэлея – Тейлора не развиваются. Профили плотности в диапазоне $0.16 < \gamma < 0.76$ типичны для неустойчивости Рэлея – Тейлора (Рис. 2). Однако исследование системы вдали от равновесия показывает, что в этом диапазоне развивается спе-

цифическая картина течения в виде периодической последовательности пальчиковых структур (SW), кончики которых образуют плоский фронт (Рис. 3). Основным механизмом поддержания барьера и стабилизации возмущений Рэлея – Тейлора является облегчение зоны реакции за счет образования воды. Бифуркация, разделяющая сценарии RT и SW, происходит при $\gamma_1 = 0.16$.

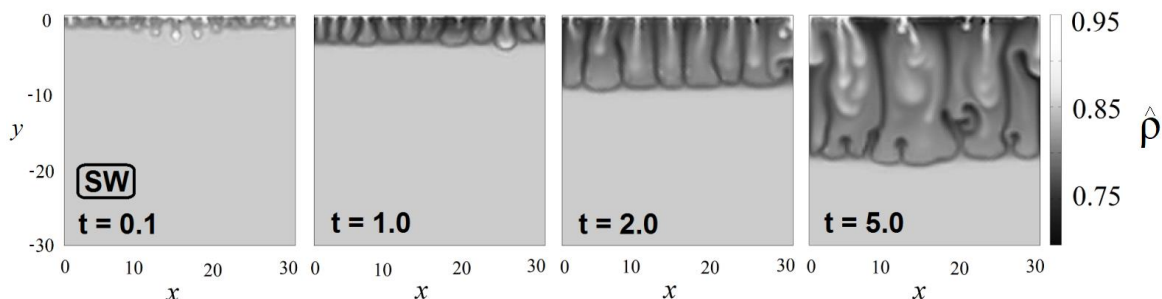


Рисунок 3. Эволюция поля плотности в режиме неустойчивости SW.

В разделе 2.2 исследуется влияние параметра G на процесс выравнивания конвективной структуры [2]. Данный параметр является фиксированным для заданной пары реагентов. Высокие значения G отвечают веществам с большой молярной массой и низкой плотностью. Из уравнений (2), (3) видно, что в этом случае плотность зоны реакции стремится к плотности растворителя. Обратная асимптотика $G \rightarrow 0$ соответствует веществам с плотной упаковкой при небольшой молярной массе. Обнаружено, что при бифуркационном значении $\gamma = 0.16$ переход от нерегулярной пальчиковой структуры RT к регулярной системе вихрей SW происходит при $G^* \approx 0.028$. Вблизи $G = G^*$ огибающая кончиков пальцев испытывает заметные деформации. При $G > G^*$ она выпрямляется, и структура единым фронтом движется в направлении поля тяжести с постоянной скоростью, уменьшающейся с ростом G . Вопреки тенденции к огрублению, ведущее волновое число вихревой структуры с течением времени приближается к асимптотическому значению $k \approx 1$ независимо от величины G . Причиной служит вторичная неустойчивость реакционного фронта: всплывающий плюм, образованный продуктом реакции, делит пальчиковую структуру на две части, что приводит к уменьшению длины волны (Рис. 4, б).

В разделе 2.3 проведено сравнение результатов численного моделирования с экспериментом [3]. В рассмотренном диапазоне начальных концентраций между ними наблюдается хорошее согласие (Рис. 4, а). Предложен сценарий эволюции системы в режиме SW. На начальном этапе происходит нерегулярное движение тяжелых пальцев вниз (Рис. 3, $t = 0.1$), в ходе чего зона реакции постепенно становится легче. Каждая пальчиковая структура состоит из плотного ядра с кислотой и оболочки, плотность которой постепенно снижается (Рис. 4, б), что приводит к выравниванию вдоль горизонтальной линии.

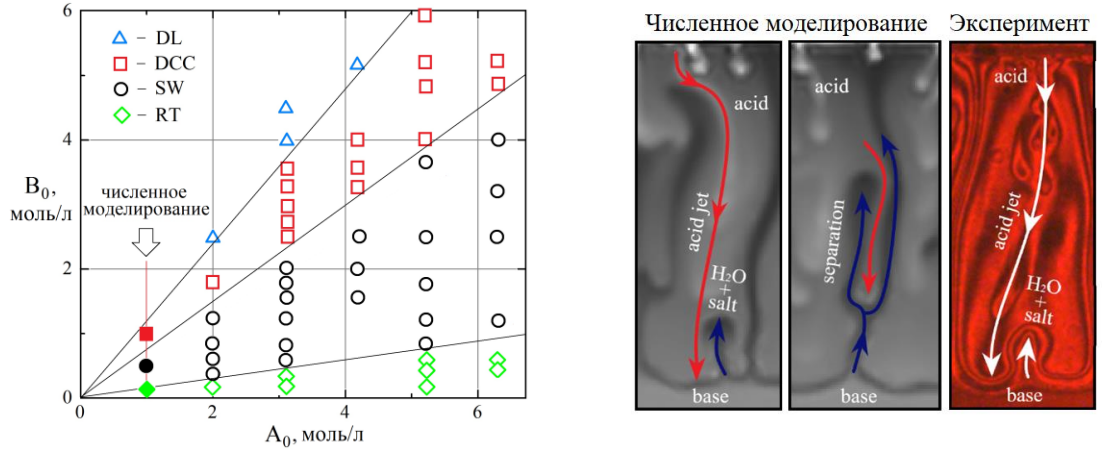


Рисунок 4. (а) Карта устойчивости на плоскости начальных концентраций; (б) Численная и экспериментальная визуализация режима SW.

Третья глава посвящена исследованию хемоконвекции в условиях равномерного вращения [4–8]. В **разделе 3.1** на основе теории возмущений выводятся уравнения конвекции вращающейся жидкости в приближении Хеле-Шоу. Малый параметр ε определяется разложением плотности

$$\rho = \rho_0(1 + \varepsilon^3 \theta), \quad (5)$$

вблизи постоянного значения ρ_0 . Неоднородность θ играет роль температуры или концентрации. Подстановка разложений в исходные уравнения приводит к системе, содержащей число Россби $Ro = U / \omega R$, которое при значительном влиянии силы Кориолиса является малым. В условиях приближения Хеле-Шоу, напротив, требуется выполнение $Ro \sim O(\varepsilon^0)$, поскольку при $h / R \rightarrow 0$ сила Кориолиса стремится к нулю. Таким образом, получается уравнение

$$Ro_0^2 \frac{d\mathbf{v}_0}{d\tau} = -\nabla p_3 + \frac{1}{\sqrt{Gr_\omega}} \nabla^2 \mathbf{v}_0 + 2Ro_0 \theta_0 \mathbf{v}_0 \times \mathbf{e}_z - \theta_0 \mathbf{e}_z \times (\mathbf{e}_z \times \mathbf{r}), \quad (6)$$

где Gr_ω — вращательное число Грасгофа. В уравнении (6) обе силы инерции представлены высшими порядками разложения, ответственными за эффекты плавучести [4].

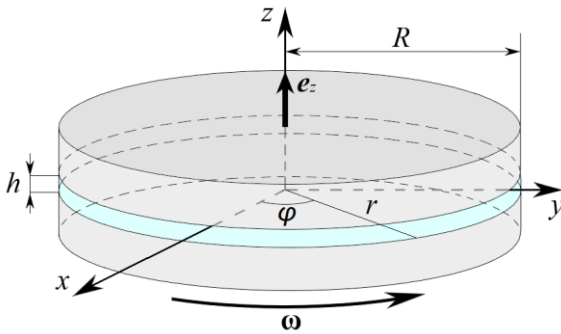


Рисунок 5. Ячейка Хеле-Шоу в цилиндрических координатах.

В **разделе 3.2** эффект плавучести Кориолиса исследуется на примере задачи о хемоконвекции в цилиндрической ячейке Хеле-Шоу, которая вращается с постоянной угловой скоростью ω (Рис. 5). Предполагается, что вариации плотности возникают в системе за счет генерации компонента переноса в химической реакции нулевого порядка. Зазор

ячейки Хеле-Шоу предполагается настолько малым, что можно пренебречь диффузией импульса и воспользоваться моделью Дарси из теории фильтрации:

$$\begin{aligned} R_{\omega} Ek \frac{1}{r} J(C, \Psi) &= \nabla^2 \Psi - R_{\omega} \frac{\partial C}{\partial \phi}, \\ \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{r} J(C, \Psi) &= \nabla^2 C + 2R_{\omega}, \\ r=1: \quad \Psi &= 0, \quad C = 0, \end{aligned} \quad (7)$$

где Ψ — функция тока, C — концентрация, R_{ω} — центробежное число Рэлея, Ek — число Экмана.

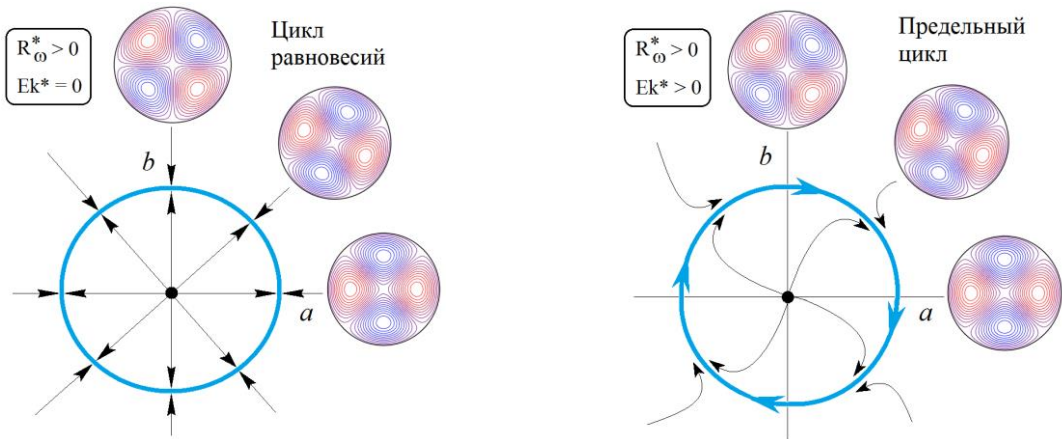


Рисунок 6. (а) Цикл равновесий ($Ek = 0$); (б) Предельный цикл ($Ek \neq 0$).

Линеаризация уравнений (7) вблизи состояния равновесия приводит к задаче линейной теории устойчивости. В рамках данной задачи показано, что при $Ek \neq 0$ спектр содержит колебательные возмущения, обуславливающие нестационарный характер течения за порогом устойчивости [5]. Решение амплитудных уравнений вблизи порога $R_{\omega} = 13.21$ показывает, что потеря устойчивости сопровождается возникновением цикла равновесий при $Ek = 0$ и устойчивого предельного цикла при $Ek \neq 0$ (Рис. 6). В ходе численного исследования динамики вдали от равновесия обнаружено, что основное состояние стабилизируется под действием силы Кориолиса. При $Ek > 0.038$ оно является абсолютно устойчивым. Пересечение нейтральной кривой на плоскости параметров (R_{ω}, Ek) сопровождается возникновением колебательной конвекции. С ростом R_{ω} происходит переход к хаотической конвекции через сложную последовательность бифуркаций тора.

В разделе 3.3 исследуется динамика хемоконвективных движений в системе смешивающихся водных растворов, помещенных в цилиндрическую ячейку Хеле-Шоу и реагирующих по схеме нейтрализации (1). Рассматривается влияние центробежной силы инерции, являющейся единственным генератором неустойчивости в системе [6, 7]. Центральная область кюветы заполнена

раствором кислоты HNO_3 , периферийная — раствором основания NaOH . Контакт между ними инициирует образование соли NaNO_3 . Вклад производства воды в плавучесть реакционной зоны для данной пары реагентов пренебрежимо мал, поэтому справедливо уравнение состояния (3) с $W(t) = 1$. Управляющими параметрами являются безразмерные начальные концентрации растворов γ_A и γ_B , центробежное число Рэлея R_A и расстояние L/R от начальной поверхности контакта растворов до оси вращения. Механизм неустойчивости в данной системе чувствителен к зависимости диффузии веществ от концентрации. На карте устойчивости существуют три бифуркационные кривые, разделяющие качественно различные профили плотности в основном состоянии [8]. Основная кривая дается выражением

$$\gamma_B = \frac{\beta_A}{\beta_B} \gamma_A = \frac{\gamma_A}{R_B}, \quad (8)$$

и представляет собой линию изопикны для центрального и периферийного слоев (Рис. 7, а; жирная сплошная линия).

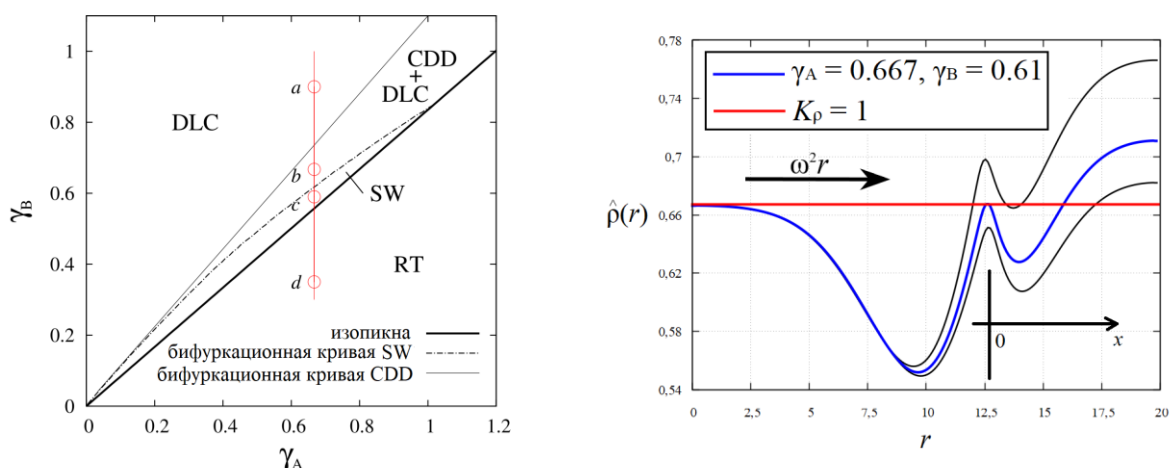


Рисунок 7. (а) Карта устойчивости на плоскости (γ_A, γ_B) ; (б) Профили плотности в режимах CDD и SW.

При достаточно малых γ_B кислота в центральной части кюветы является более плотной, что приводит к развитию неустойчивости Рэлея – Тейлора. Реакция нейтрализации в сочетании с концентрационно-зависимой диффузией может привести к возникновению плотностной потенциальной ямы и поддерживать ее в течение длительного времени. Условие ее появления (Рис. 7, а; тонкая сплошная линия) определяется точкой перегиба в профиле плотности.

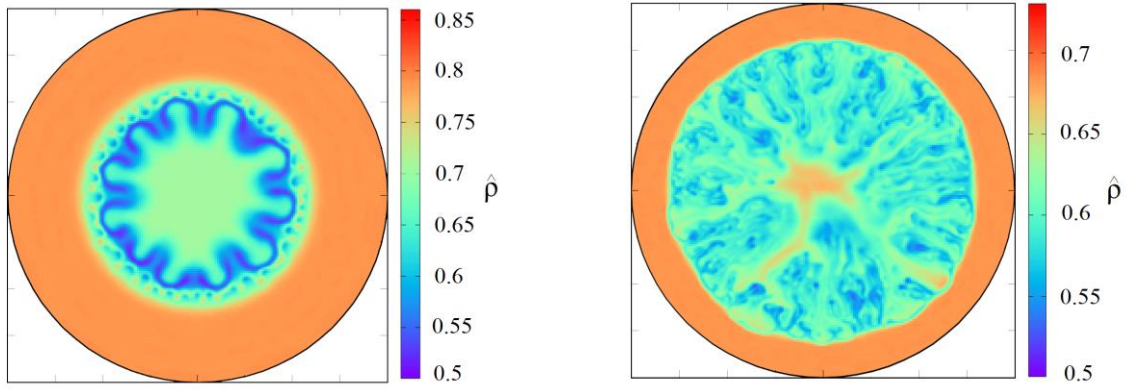


Рисунок 8. Поля безразмерной плотности: (а) Ячеистая конвекция CDD; (б) Волна плотности SW.

Снижение γ_B приводит к пересечению кривой (Рис. 7, а; штрихпунктирная линия), определяющей равенство плотностей реакционной зоны и центрального слоя:

$$\hat{\rho}^0(t, 0) = \hat{\rho}^0(t, r_{\max}), \quad (9)$$

где $r_{\max}$ — положение локального максимума плотности (Рис. 7, б). Максимум формируется за счет образования соли, коэффициент диффузии которой уменьшается с ростом концентрации. При $\hat{\rho}^0(0) < \hat{\rho}^0(r_{\max})$ по разные стороны от максимума развиваются ячеистая конвекция CDD и неустойчивость DLC в виде плюмов, всплывающих к центру (Рис. 8, а). Если $\hat{\rho}^0(0) > \hat{\rho}^0(r_{\max})$, фронт реакции быстро всплывает к центру кюветы, образуя вокруг себя вторичные вихри и формируя радиальные направления для подачи кислоты к периферии (Рис. 8, б). Это приводит к ускорению перемешивания растворов и стремительному расширению реакционной зоны, схожему с цилиндрической плотностной волной. При этом механическое равновесие в области, занятой раствором основания, не нарушается.

В заключении приведены основные результаты работы:

1. Установлен механизм динамической стабилизации хемоконвективной структуры в системе несмешивающихся реагирующих растворов сильной кислоты и основания. Показано, что регулярность паттерна обеспечивается производством воды в ходе реакции. Данный эффект описывается интегральной поправкой в слагаемом плавучести уравнений движения. Определены значения начальных концентраций растворов и интенсивности производства воды, при которых регулярная структура вихрей сменяется неустойчивостью Рэлея – Тейлора.

2. Установлена роль силы Кориолиса в квазидвумерных течениях вращающейся неоднородной жидкости в геометрии Хеле-Шоу. В рамках теории возмущений получены уравнения конвекции, включающие силу плавучести Кориолиса. Показано, что равновесие вращающейся жидкости с внутренней

генерацией компонента переноса сменяется колебательной конвекцией. Под влиянием эффекта плавучести равновесие стабилизируется, а переход к хаотической конвекции осложняется бифуркациями тороидальных аттракторов.

3. Выявлены сценарии развития неустойчивости в системе смешивающихся реагирующих растворов во вращающейся ячейке Хеле-Шоу. Показано, что нелинейное взаимодействие реакции и диффузии приводит к возникновению потенциальных ям в поле плотности среды. Под действием центробежной силы в них возбуждается неустойчивость в виде регулярной последовательности хемоконвективных ячеек. При определенном соотношении начальных концентраций реагентов ячеистая конвекция сменяется плотностной волной ударного типа. Получено аналитическое выражение для бифуркационной кривой этих режимов. Определены границы существования режимов в пространстве управляющих параметров.

Публикации автора по теме диссертации:

1. **Utochkin V. Yu.**, Bratsun D. A. Spontaneous ordering of chemoconvective fingering near an interface in a reacting solution // *Interfacial Phenom. Heat Transf.* — 2022. — Vol. 10, no. 4.

2. **Utochkin V. Yu.**, Siraev R. R., Bratsun D. A. Alignment of Fingering Pattern Induced by an Interfacial Neutralization Reaction // *Interfacial Phenom. Heat Transf.* — 2024. — Vol. 12, no. 2.

3. Bratsun D., Mizev A., **Utochkin V.**, Nekrasov S., Shmyrova A. Nonlinear development of convective patterns driven by a neutralization reaction in immiscible two-layer systems // *Phil. Trans. R. Soc. A.* — 2023. — Vol. 381, no. 2245.

4. **Utochkin V. Yu.**, Bratsun D. A. Convection induced by centrifugal and Coriolis buoyancy in a rotating Hele-Shaw reactor // *Phys. Fluids.* — 2024. — Vol. 36, no. 9.

5. **Уточкин В. Ю.**, Брацун Д. А. Устойчивость слоя жидкости во вращающемся реакторе Хеле-Шоу при конкуренции эффектов плавучести, генерируемых силами инерции // *Вычисл. Мех. Сплош. Сред.* — 2025. — Т. 18, № 1. — С. 15—31.

6. **Уточкин В. Ю.**, Сираев Р. Р., Брацун Д. А. Хемоконвективные структуры во вращающейся системе реагирующих жидкостей // *Вычисл. Мех. Сплош. Сред.* — 2020. — Т. 13, № 2. — С. 205—218.

7. **Utochkin V. Yu.**, Siraev R. R., Bratsun D. A. Chemoconvective Structures in a Rotating System of Reacting Liquids // *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* — 2021. — Vol. 62, no. 7.

8. **Utochkin V. Yu.**, Siraev R. R., Bratsun D. A. Pattern Formation in Miscible Rotating Hele-Shaw Flows Induced by a Neutralization Reaction // *Microgravity Sci. Technol.* — 2021. — Vol. 33, no. 6.