



УДК 004.942
DOI: 10.37661/1816-0301-2024-21-4-46-57

Оригинальная статья
Original Article

Компьютерное моделирование диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения в программном комплексе Wolfram Mathematica

П. К. Шалькевич^{1✉}, Н. А. Шилов², Н. Н. Гринчик³

¹Международный государственный экологический институт имени А. Д. Сахарова
Белорусского государственного университета,
ул. Ботаническая, 15, Минск, 220037, Беларусь
✉E-mail: p.k.shalkevich@gmail.com

²Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
ул. П. Бровки, 6, Минск, 220013, Беларусь

³Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова
Национальной академии наук Беларуси,
ул. П. Бровки, 15, Минск, 220072, Беларусь

Аннотация

Цели. Целью работы является компьютерное моделирование диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения согласно модели, предложенной одним из авторов статьи, в программном комплексе Wolfram Mathematica.

Методы. Для численного решения одномерной задачи использовалась встроенная функция *NDSolveValue* в Wolfram Mathematica и решатель, заданный по умолчанию; для численного решения двумерной задачи – та же функция, для которой в качестве решателя был задан метод прямых.

Результаты. Получены результаты компьютерного моделирования диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения для двух задач в одномерной постановке и одной задачи в двумерной постановке.

Заключение. Проведенные исследования и полученные решения при компьютерном моделировании диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения свидетельствуют о том, что для решения задач в области компьютерного моделирования смешения газов в современных программных средствах может применяться математическая модель, альтернативная популярным современным моделям, основанным на описании гидродинамических свойств газов и энтальпии смешения, а также другим энтропийным моделям.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, математическое моделирование, диффузия газов, энтропия смешения газов, химический потенциал, численные методы

Для цитирования. Шалькевич, П. К. Компьютерное моделирование диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения в программном комплексе Wolfram Mathematica / П. К. Шалькевич, Н. А. Шилов, Н. Н. Гринчик // Информатика. – 2024. – Т. 21, № 4. – С. 46–57. – DOI: 10.37661/1816-0301-2024-21-4-46-57.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Поступила в редакцию | Received 21.07.2024
Подписана в печать | Accepted 06.09.2024
Опубликована | Published 30.12.2024

Computer modeling of a diffusion in a mixture of ideal gases given the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing in Wolfram Mathematica

Pavel K. Shalkevich^{1✉}, Nikolay A. Shilov², Nikolay N. Grinchik³

¹*International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University, st. Botanicheskaya, 15, Minsk, 220037, Belarus*

✉E-mail: p.k.shalkevich@gmail.com

²*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, st. P. Brovki, 6, Minsk, 220013, Belarus*

³*A. V. Luikov heat and mass transfer institute of the National academy of sciences of Belarus, st. P. Brovki, 15, Minsk, 220072, Belarus*

Abstract

Objectives. The objective of the work is computer modeling of diffusion in ideal gas mixtures taking into account the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing according to the model proposed by one of the authors of the article, in Wolfram Mathematica.

Methods. Built-in function *NDSolveValue* in Wolfram Mathematica and the default solver were used for the numerical solution of the one-dimensional task; for the numerical solution of the two-dimensional task the same function was used, for which the Numerical Method of Lines was specified as the solver.

Results. The results of computer modeling of diffusion in a mixture of ideal gases are obtained taking into account the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing for two tasks in a one-dimensional formulation and one task in a two-dimensional formulation.

Conclusion. The conducted research and the obtained solutions in computer modeling of diffusion in a mixture of ideal gases taking into account the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing indicate that for solving tasks in the field of computer modeling of gas mixing in modern software tools could be used a mathematical model that is an alternative to popular modern models based on the description of the hydrodynamic properties of gases and the enthalpy of mixing, as well as other entropy models.

Keywords: computer modeling, mathematical modeling, gas diffusion, entropy of gas mixing, chemical potential, numerical methods

For citation. Shalkevich P. K., Shilov N. A., Grinchik N. N. *Computer modeling of a diffusion in a mixture of ideal gases given the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing in Wolfram Mathematica*. *Informatika [Informatics]*, 2024, vol. 21, no. 4, pp. 46–57 (In Russ.).

DOI: 10.37661/1816-0301-2024-21-4-46-57.

Conflict of interest. The authors declare of no conflict of interest.

Введение. Компьютерное моделирование диффузионных процессов в газах является перспективным направлением для решения задач в области радиоэкологии, агроэкологии, а также постчернобыльских и прочих экологических проблем [1, 2]. Кроме того, компьютерное моделирование газов может быть применено для исследования физических процессов, описывающих диффузию газов, что позволит усовершенствовать подходы и методы, используемые для улучшения экологической обстановки как открытых к внешним воздействиям систем, так и закрытых от них.

В настоящее время описанию диффузионных процессов в газах посвящено немало работ [3], однако некоторые пробелы в их описании, обозначенные учеными еще в прошлом веке [4, 5], являются незаполненными по сей день [3]. Так, Дж. Гиббс при анализе изменения энтропии при диффузии газов [4] установил, что возрастание энтропии, вызванное смешением разного рода газов при постоянных температуре и давлении, не зависит от природы этих газов, в то

время как смешение двух масс одного и того же идеального газа не вызывает возрастания энтропии. Таким образом, смешение двух одинаковых газов нельзя рассматривать как предельный случай смешения двух разных газов и при переходе от смешения сколь угодно близких газов к смешению тождественных газов изменение энтропии испытывает скачок (парадокс Гиббса) [4]. А. Эйнштейн, в свою очередь, в работе по квантовой теории идеального газа обратил внимание на парадокс [5], к которому приводит эта теория и который заключается в том, что смесь вырожденных газов из N_1 атомов с массой m_1 и N_2 атомов с массой m_2 (как угодно мало отличающейся от m_1) при заданной температуре имеет иное давление, чем простой газ с числом атомов $N_1 + N_2$, обладающий практически той же массой атомов и находящийся в том же объеме.

Изложенное выше во многом объясняет существующую практику и подходы в области компьютерного моделирования смешения газов [6–8], которая при известной достоверности не объясняет всей природы диффузионных процессов при смешении газов. Поэтому особую значимость имеет компьютерная реализация математической модели диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения, впервые представленная в работе [3].

В настоящей статье компьютерное моделирование диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения выполняется в программном комплексе Wolfram Mathematica в одномерной и двумерной постановке.

Компьютерное моделирование диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения в одномерной постановке. Согласно работе [9] энтропия смеси идеальных газов равна сумме энтропии всех компонентов смеси, взятых при температуре смеси, и их парциальных давлений P_i . При этом энтропия смешения

$$\Delta S_{см} = -R \left(\sum_{i=1}^N \frac{M_i}{v_i} \right) \left(\sum_{i=1}^N x_i \ln(x_i) \right), \quad (1)$$

где x_i – молярная концентрация i -го компонента смеси; M_i – масса i -го газа; v_i – молярная масса i -го газа.

С учетом энтропии смешения при смеси идеальных газов поток массы компонента x_i будет определяться не только его градиентом, но и степенью неупорядоченности смеси, т. е. энтропией смешения:

$$q_i = -D_i \Delta S_{см} x_i \nabla \mu_i, \quad (2)$$

где D_i – коэффициент диффузии компонента x_i ; $S_{см}$ – энтропия смешения; μ_i – химический потенциал i -го газа.

Следует отметить, что коэффициент диффузии компонента 1 не равен коэффициенту диффузии компонента 2.

Химический потенциал для идеального газа при невысоких давлениях известен [10]:

$$\mu_i = RT \ln(x_i) + \mu_0(T). \quad (3)$$

Следовательно,

$$\nabla \mu_i = \nabla RT \ln(x_i) = R \ln(x_i) \nabla T + \frac{RT}{x_i} \nabla x_i. \quad (4)$$

Учитывая, что $\ln(f) = f'/f$, для бинарной смеси в единице объема получим равенство

$$\vec{q}_i = -D_i \Delta S_{см} R x_i \nabla \mu_i = -D_{эфф} (T \nabla x_i + \ln x_i \nabla T). \quad (5)$$

Следовательно, эффективный коэффициент диффузии для смеси идеальных газов с учетом энтропии смешения определяется следующим выражением:

$$D_{iэфф} = D_i \Delta S_{cx_i} R. \quad (6)$$

Для решения задачи моделирования диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения в одномерной постановке уравнение диффузии имеет вид [3]

$$\frac{\partial C_1}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{эфф} C_1 \frac{\partial (T \ln C_1)}{\partial x} \right), \quad (7)$$

где C_1 – концентрация газа А в точке X в момент времени t , %; $D_{эфф}$ – эффективный коэффициент диффузии, $K^0 \cdot c/m^2$; T – температура смеси газов, K^0 .

В качестве исходных условий для задачи моделирования диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения в одномерной постановке используем следующие: газы А и В разделены непроницаемой мембраной и находятся в баллоне длиной 1 м (рис. 1), мембрана находится на расстоянии 0,5 м от торцов баллона. В некоторый момент времени мембрану удаляют и идет диффузионное смешение газов А и В. Требуется найти эволюцию во времени и зависимость от координаты x концентрации газов А и В. При этом C_2 – концентрация газа В в точке X в момент времени t .

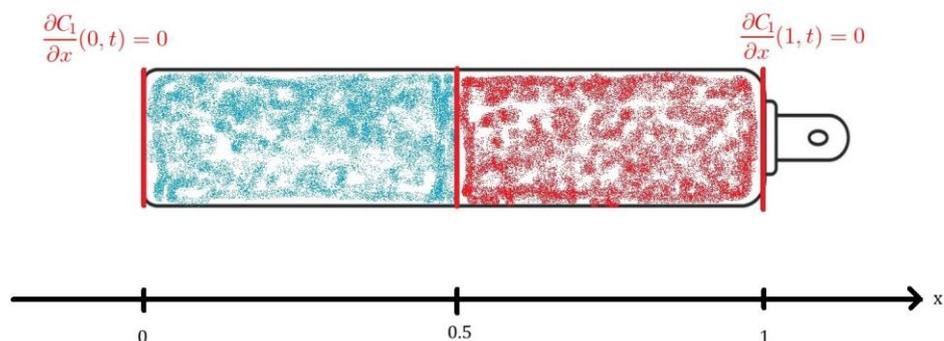


Рис. 1. Исходные условия для задачи моделирования диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения в одномерной постановке, $D_{эфф} = 0,002$

Fig. 1. The initial conditions for the problem of modeling diffusion in a mixture of ideal gases taking into account the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing in a one-dimensional formulation, $D_{eff} = 0,002$

Сформулируем следующие начальные и граничные условия:

$$C_1 + C_2 = 1; \quad (8)$$

$$C_1(x, 0) = 1, \forall x \in [0, 0,5]; \quad (9)$$

$$C_1(x, 0) = 0, \forall x \in [0,5; 1]; \quad (10)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial x}(0, t) = 0, \forall t > 0; \quad (11)$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial x}(1, t) = 0, \forall t > 0. \quad (12)$$

Выражения (11), (12) свидетельствуют о том, что потоки массы газа на левой и правой стенках сосуда равны нулю.

Компьютерное моделирование производилось в программном комплексе Wolfram Mathematica при помощи функции *NDSolveValue* (приложение А). Результаты компьютерного моделирования показаны на рис. 2, где изменение концентрации газа А отображено красным цветом, а газа В – синим.

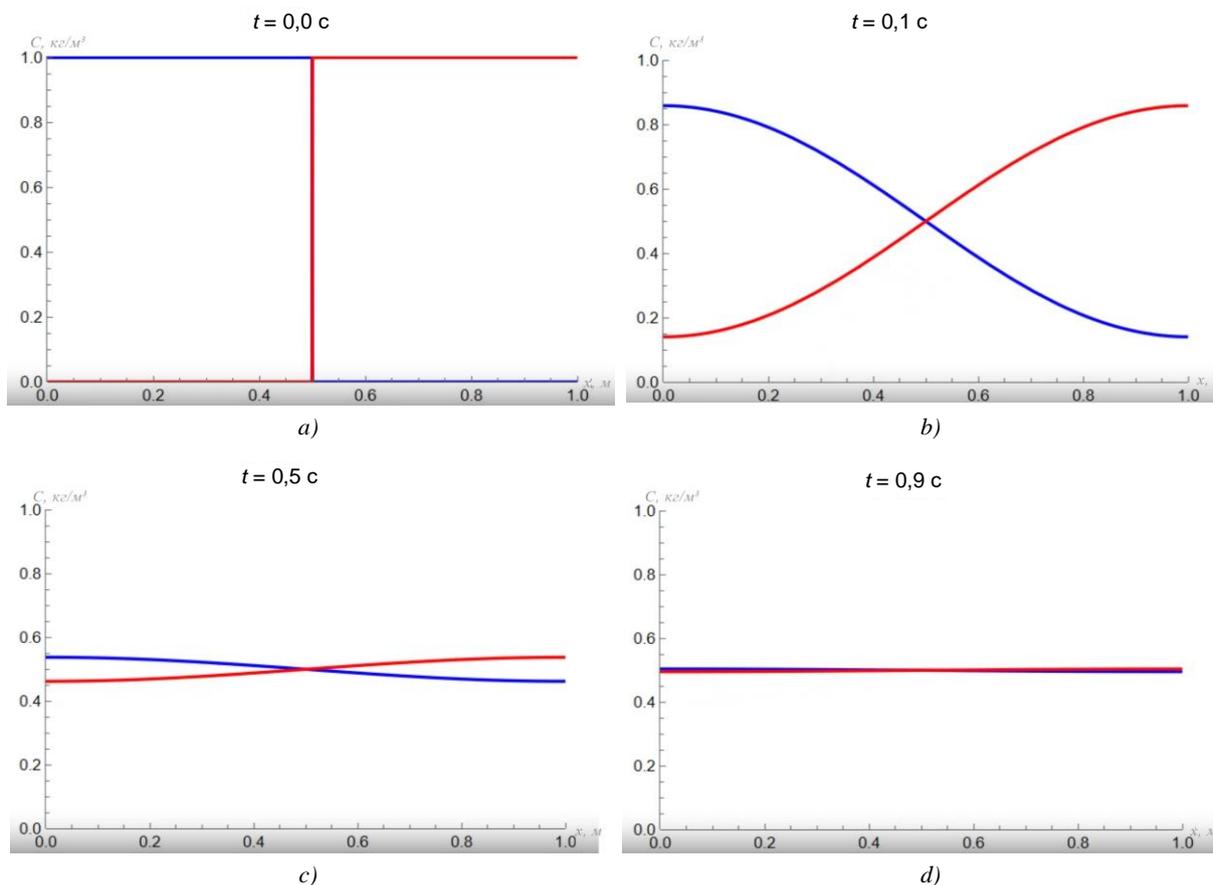


Рис. 2. Результаты компьютерного моделирования диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения в одномерной постановке: *a)* в начальный момент времени; *b)* момент времени $t = 0,1$ с; *c)* момент времени $t = 0,5$ с; *d)* момент времени $t = 0,9$ с

Fig. 2. Results of computer simulation of diffusion in a mixture of ideal gases taking into account the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing in a one-dimensional formulation: a) at the initial time; b) time $t = 0,1$ s; c) time $t = 0,5$ s; d) time $t = 0,9$ s

Описанная выше задача представляет собой простейший случай смешения двух газов, однако в реальных условиях, в том числе производственных [11, 12], может возникнуть необходимость в решении более сложных задач. Поэтому имеет смысл рассмотреть решение задачи со следующими условиями:

$$C_1(x, 0) = 1, \forall x \in [0, 1; 0, 3] \cup [0, 7; 0, 8]. \quad (13)$$

При этом на промежутках, не показанных в равенстве (7), соблюдается условие

$$C_1(x, 0) = 0. \quad (14)$$

Схематическая интерпретация задачи с исходными условиями, описанными в уравнениях (13) и (14), показана на рис. 3.

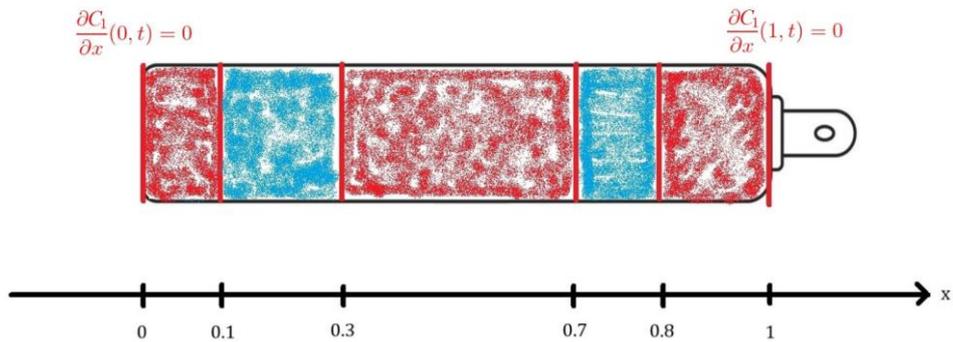


Рис. 3. Исходные условия для усложненной задачи моделирования диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения в одномерной постановке

Fig. 3. The initial conditions for the complicated task of modeling diffusion in a mixture of ideal gases taking into account the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing in a one-dimensional formulation

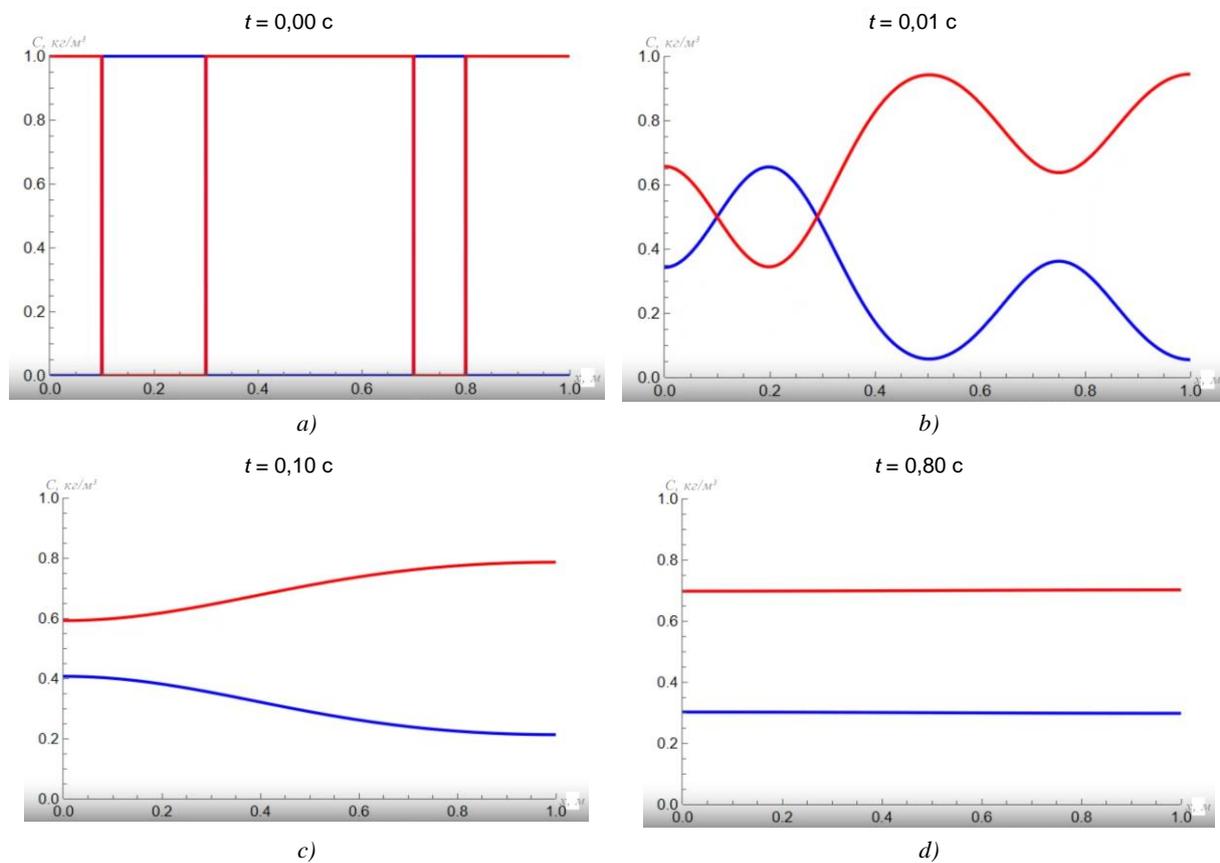


Рис. 4. Результаты компьютерного моделирования диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения в одномерной постановке (усложненная задача): a) в начальный момент времени; b) момент времени $t = 0,01$ с; c) момент времени $t = 0,1$ с; d) момент времени $t = 0,8$ с

Fig. 4. Results of computer simulation of diffusion in a mixture of ideal gases taking into account the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing in a one-dimensional formulation (complicated task): a) at the initial time; b) time $t = 0,01$ s; c) time $t = 0,1$ s; d) time $t = 0,8$ s

Результаты компьютерного моделирования диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения в программном комплексе Wolfram Mathematica показаны на рис. 4.

Компьютерное моделирование диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения в двумерной постановке. Пусть имеется замкнутый квадрат с длиной стороны 1 (рис. 5). В него помещают малый замкнутый квадрат, который наполняют газом А (красный). Снаружи малого квадрата большой квадрат заполняют газом В (голубой). Стенки малого квадрата убирают, и начинается диффузное смешение газов А и В. Следует рассчитать концентрацию газов А и В в любой точке в любой момент времени.

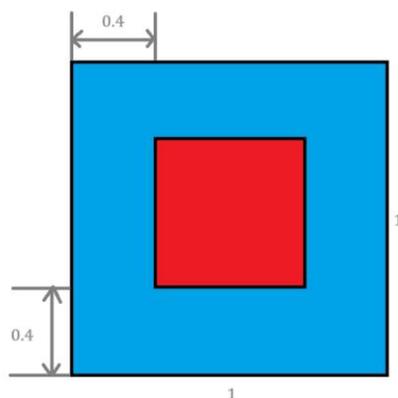


Рис. 5. Исходные условия для усложненной задачи моделирования диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения в двумерной постановке

Fig. 5. The initial conditions for the problem of modeling diffusion in a mixture of ideal gases taking into account the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing in a two-dimensional formulation

Уравнение (1) для поставленной задачи примет следующий вид:

$$\frac{\partial C_1}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_t C_1 \frac{\partial}{\partial x} (T \ln C_1) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_t C_1 \frac{\partial}{\partial y} (T \ln C_1) \right). \quad (15)$$

Для решения задачи необходимо выполнить условие (14), а также условия

$$C_1(x, y, t) = 1, \forall x \in [0, 4; 0, 6], \forall y \in [0, 4; 0, 6]; \quad (16)$$

$$C_1(x, y, t) = 0, \forall x; \quad (17)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial x}(0, y, t) = 0; \quad (18)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial x}(1, y, t) = 0; \quad (19)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial y}(x, 0, t) = 0; \quad (20)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial y}(x, 1, t) = 0; \quad (21)$$

$$D_t = 0,002, T = 283K^\circ. \quad (22)$$

Результаты компьютерного моделирования в программном комплексе Wolfram Mathematica при помощи функции *NDSolveValue*, для которой в качестве решателя был задан метод прямых (приложение Б), показаны на рис. 6.

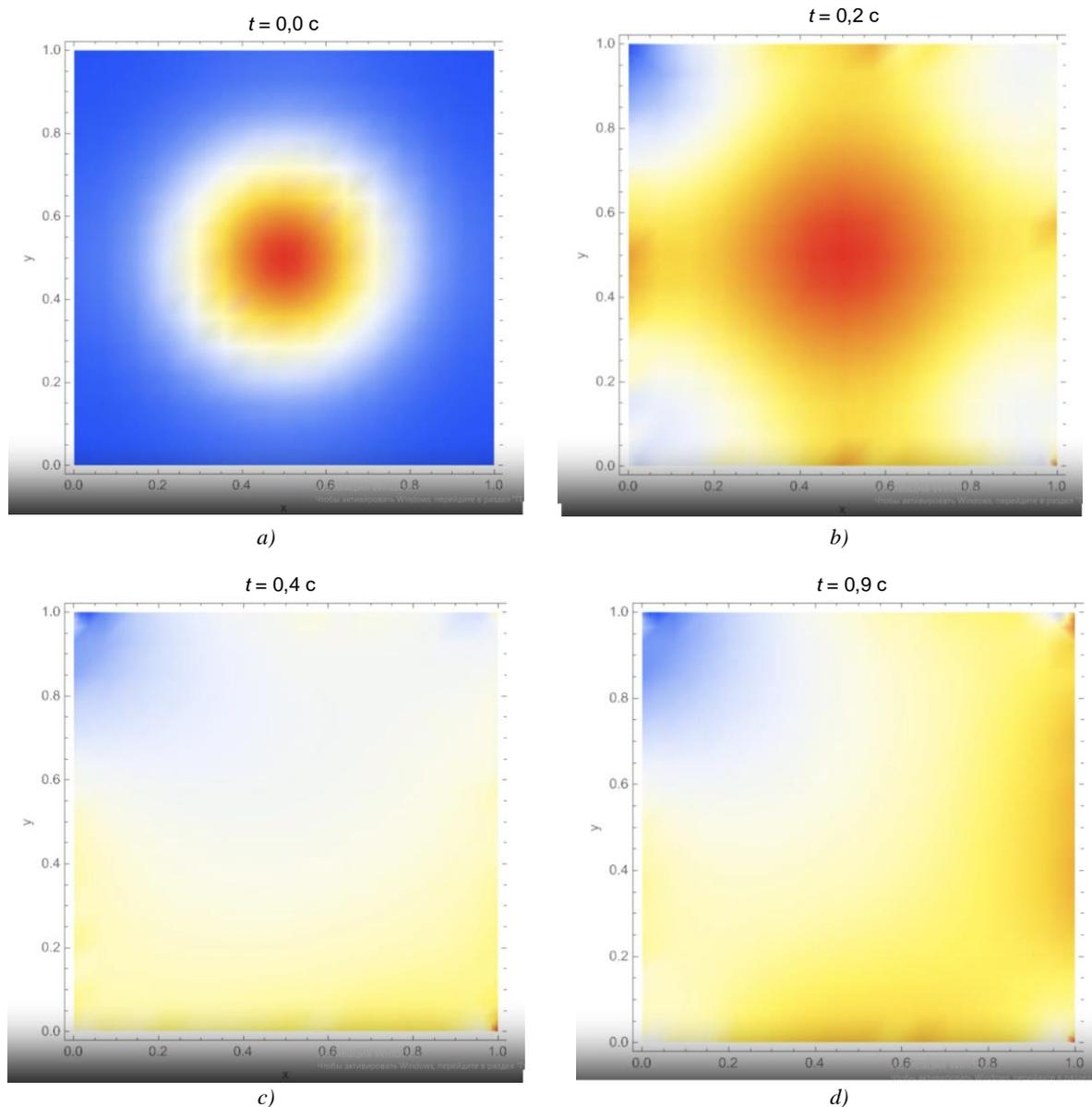


Рис. 6. Результаты компьютерного моделирования диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения в двумерной постановке (усложненная задача): *a*) в начальный момент времени; *b*) момент времени $t = 0,2$ с; *c*) момент времени $t = 0,4$ с; *d*) момент времени $t = 0,9$ с

Fig. 6. Results of computer simulation of diffusion in a mixture of ideal gases taking into account the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing in a two-dimensional formulation (complicated task):

a) at the initial time; b) at time $t = 0,2$ s; c) at time $t = 0,4$ s; d) at time $t = 0,9$ s

Заключение. Проведенные исследования и полученные решения при компьютерном моделировании диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения свидетельствуют о том, что для решения задач в области компьютерного моделирования смешения газов в современных программных средствах может применяться математическая модель, альтернативная популярным современным, основанным на описании гидродинамических свойств газов и энтальпии смешения [6–8], а также другим энтропийным

моделям. Кроме того, настоящее исследование демонстрирует подход, который дает возможность моделировать процессы диффузии смеси газов с учетом основных положений термодинамики за счет учета влияния на диффузию градиента температуры. Представленный подход позволит при решении задач конвективной сушки, когда концентрации пара и воздуха сопоставимы, осуществлять прогнозирование коэффициента массообмена, основываясь на том, что поток массы может быть использован для определения химического потенциала. Важно также отметить отличие предложенной модели диффузии газов от существующих энтропийных моделей, используемых для решения задач тепломассообмена, при применении которых важно учитывать скачок функции энтропии, вызванный парадоксом Гиббса. Это при практическом использовании вызывает проблемы, связанные с невозможностью выполнения закона сохранения массы по причине разрыва функции энтропии. Тогда как предложенная авторами модель демонстрирует классический подход решения задач тепломассопереноса, используя энтропию косвенно и учитывая зависимость коэффициента диффузии от энтропии смешения. Так как учет энтропии выводится через химический потенциал, для определения которого может быть использован поток массы, предложенная модель удовлетворяет закону сохранения массы. На этом же основании существуют перспективы применения описанной модели смешения газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения для решения задач разделения изотопов и учета перекрестных эффектов в структурно-неоднородных средах. Также несмотря на то, что вычисление энтропии смешения не являлось целью настоящего исследования, полученное в представленной работе определение коэффициента диффузии дает возможность осуществить оценку ее изменения в последующих работах. При этом необходимо отметить, что численная оценка изменения энтропии смешения согласно предложенной модели, а также верификация этой модели и поиск наиболее приемлемых численных методов ее решения будут являться темами дальнейших исследований.

Вклад авторов. *П. К. Шалькевич* определил цель и задачи проведенных исследований, сформулировал введение и заключение, провел эксперимент и осуществил научное редактирование статьи. *Н. А. Шилов* написал код в Wolfram Mathematica, провел компьютерное моделирование диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения. *Н. Н. Гринчик* разработал математическую модель диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения, определил научную проблему, которую решает эта математическая модель.

Список использованных источников

1. Драганов, Б. Х. Динамика диффузии вредных выбросов в атмосфере / Б. Х. Драганов // *Альтернативная энергетика и экология*. – 2014. – № 15(155). – С. 122–125.
2. Прохоров, А. В. Диффузионная модель распространения выбросов в атмосфере / А. В. Прохоров // *Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук*. – 2010. – № 12. – С. 61–62.
3. Гринчик, Н. Н. Диффузия в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения / Н. Н. Гринчик, Г. М. Заяц // *XXI Междунар. науч. конф. по дифференциальным уравнениям (Еругинские чтения–2023)*, Могилев, 23–27 мая 2023 г. : материалы конф. : в 2 ч. – Могилев : Белорус.-Рос. ун-т, 2023. – Ч. 2. – С. 81–83.
4. Гиббс, Дж. В. Термодинамические работы : пер. с англ. / Дж. В. Гиббс. – М.–Л. : Гостехиздат, 1950. – 492 с.
5. Эйнштейн, А. Собрание научных трудов : в 4 т. / А. Эйнштейн. – М. : Наука, 1966. – Т. 3. – 632 с.
6. Elizarova, T. Numerical simulation of shock wave structure in nitrogen / T. Elizarova, A. Khokhlov, S. Montero // *Physics of Fluids*. – 2007. – Vol. 19, no. 6. – P. 068102.
7. Roj, E. CFD study of gas mixing efficiency and comparisons with experimental data / E. Roj, M. Dmoch // *17th European Symp. on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE17)*, Bucharest, Romania, 27–30 May 2007. – Elsevier, 2007. – Vol. 24. – P. 509–514.
8. Numerical insights into gas mixing system design for energy conversion processes / M. Klevs, G. Zageris, A. A. Ziemelis [et al.] // *Latvian Journal of Physics and Technical Sciences*. – 2023. – No. 6. – P. 44–59.

9. Яворский, Б. М. Справочник по физике для инженеров и студентов вузов / Б. М. Яворский, А. А. Детлаф, А. К. Лебедев ; науч ред. А. К. Лебедев. – 8-е изд., перераб. и испр. – М. : Оникс, 2006. – 1056 с.

10. Киселев, А. П. Основы общей химии. Ч. 2. Термодинамика и кинетика химического процесса : учеб. пособие / А. П. Киселев, А. А. Крашенинников. – СПб. : Балт. гос. техн. ун-т, 2003. – 116 с.

11. Клинов, А. В. Молекулярное моделирование коэффициентов диффузии газов в полимерах / А. В. Клинов, И. П. Анашкин, Л. Р. Минибаева // Вестник Казанского технологического университета. – 2017. – № 19. – С. 57–59.

12. Паскарь, С. Ю. Аномальная диффузия идеального газа в геологической среде с флуктуирующими свойствами / С. Ю. Паскарь // Нефть и газ–2020 : сб. тр. 74-й Междунар. молодежной науч. конф., Москва, 28 сент. – 2 окт. 2020 г. – М. : Рос. гос. ун-т нефти и газа (Нац. исслед. ун-т) имени И. М. Губкина, 2020. – С. 296–302.

References

1. Draganov B. H. *Dynamics of diffusion of harmful emissions in the atmosphere*. *Al'ternativnaya energetika i ekologiya [Alternative Energy and Ecology]*, 2014, no. 15(155), pp. 122–125 (In Russ.).

2. Prohorov A. V. *Diffusion model of emission distribution in the atmosphere*. *Aktual'nye problemy gumanitarnyh i estestvennyh nauk [Current Issues in the Humanities and Natural Sciences]*, 2010, no. 12, pp. 61–62 (In Russ.).

3. Grinchik N. N., Zayac G. M. *Diffusion in a mixture of ideal gases taking into account the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing*. XXI Mezhdunarodnaja nauchnaja konferencija po differencial'nym uravnenijam (Eruginskie chtenija–2023), Mogilev, 23–27 maja 2023 g. : materialy konferencii : v 2 chastjah [XXI International Scientific Conference on Differential Equations (Erugin Readings–2023), Mogilev, 23–27 May 2023 : Conference Proceedings : in 2 Parts]. Mogilev, Belorussko-Rossijskij universitet, 2023, part 2, pp. 81–83 (In Russ.).

4. Gibbs J. W. *The collected works of J. Willard Gibbs : in Two Volumes. Vol. 1. Thermodynamics*. New York, Longmans, Green and Co., 1928, 434 p.

5. Ejnshtejn A. *Sobranie nauchnyh trudov : v 4 tomah. Collection of Scientific Papers : in 4 Volumes*. Moscow, Nauka, 1966, vol. 3, 632 p. (In Russ.).

6. Elizarova T., Khokhlov A., Montero S. Numerical simulation of shock wave structure in nitrogen. *Physics of Fluids*, 2007, vol. 19, no. 6, p. 068102.

7. Roj E., Dmoch M. CFD study of gas mixing efficiency and comparisons with experimental data. *17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE17), Bucharest, Romania, 27–30 May 2007*. Elsevier, 2007, vol. 24, pp. 509–514.

8. Klevs M., Zageris G., Ziemelis A. A., Dzelme V., Geza V., Jakovics A. Numerical insights into gas mixing system design for energy conversion processes. *Latvian Journal of Physics and Technical Sciences*, 2023, no. 6, pp. 44–59.

9. Yavorskij B. M., Detlaf A. A., Lebedev A. K. *Spravochnik po fizike dlya inzhenerov i studentov vuzov. Physics Handbook for Engineers and University Students*. In A. K. Lebedev (ed.). Moscow, Oniks, 2006, 1056 p. (In Russ.).

10. Kiselev A. P., Krasheninnikov A. A. *Osnovy obshchej himii. Chast' 2. Termodinamika i kinetika himicheskogo processa. Fundamentals of General Chemistry. Part 2. Thermodynamics and Kinetics of Chemical Processes*. Saint Petersburg, Baltijskij gosudarstvennyj tehničeskij universitet, 2003, 116 p. (In Russ.).

11. Klinov A. V., Anashkin I. P., Miniabaeva L. R. Molecular modeling of gas diffusion coefficients in polymers. *Vestnik Kazanskogo tekhnologičeskogo universiteta [Bulletin of Kazan Technological University]*, 2017, no. 19, pp. 57–59 (In Russ.).

12. Paskar' S. Yu. *Anomalous diffusion of an ideal gas in a geological environment with fluctuating properties*. *Neft' i gaz–2020 : sbornik trudov 74-j Mezhdunarodnoj molodezhnoj nauchnoj konferencii, Moskva, 28 sentjabrja – 2 oktjabrja 2020 g. [Oil and Gas 2020 : Proceedings of the 74th International Youth Scientific Conference, Moscow, 28 September – 2 October 2020]*. Moscow, Rossijskij gosudarstvennyj universitet nefti i gaza (Nacional'nyj issledovatel'skij universitet) imeni I. M. Gubkina, 2020, pp. 296–302 (In Russ.).

Приложение А. Скрипт в Wolfram Mathematica для решения задачи, показанной на рис. 1

```

T = 283; (*температура внутри баллона*)
Dt = 0.002; (*эффективный коэффициент диффузии*)
t1 = 1; (*длительность вычисляемого решения*)
x0 = 0; x1 = 1; (*координаты начала и конца баллона*)

equation = D[c[x, t], t] == D[Dt*c[x, t]*D[T*Log[c[x, t]], x], x];
conditions = {
  c[x, 0] == If[0 <= x <= 0.5, 1, 0],
  Derivative[1, 0][c][x0, t] == 0,
  Derivative[1, 0][c][x1, t] == 0
};

(* численное решение уравнений с заданными условиями*)
solution = NDSolveValue[{equation, conditions}, c, {x, x0, x1}, {t, 0, t1}]

(*визуализация*)
Manipulate[
Module[{plot1, plot2},
plot1 = Plot[solution[x, t], {x, x0, x1},
  PlotRange -> {{x0, x1}, {0, 1}}, AxesLabel -> {"x", "c"},
  PlotLabel ->
  StringForm["t = `` sec", NumberForm[t, {Infinity, 4}]],
  PlotStyle -> Blue];
plot2 = Plot[1 - solution[x, t], {x, x0, x1}, PlotStyle -> Red];
Show[plot1, plot2], {t, 0, t1, 0.0001}]

```

Приложение Б. Скрипт в Wolfram Mathematica для решения задачи, показанной на рис. 5

```

T = 283; (*temperature inside the tank*)
Dt = 0.002; (*diffusion coefficient*)
t1 = 1; (*end time*)
x0 = 0; x1 = 1; (*start and end x coordinates of the square*)
y0 = 0; y1 = 1; (*start and end y coordinates of the square*)

equation = D[c[x, y, t], t] == D[Dt*c[x, y, t]*D[T*Log[c[x, y, t]], x], x] + D[Dt*c[x, y, t]*D[T*Log[c[x, y, t]], y], y];
conditions = {
  c[x, y, 0] == If[0.4 <= x <= 0.6 && 0.4 <= y <= 0.6, 1, 0],
  Derivative[1, 0, 0][c][x0, y, t] == 0,
  Derivative[1, 0, 0][c][x1, y, t] == 0,
  Derivative[0, 1, 0][c][x, y0, t] == 0,
  Derivative[0, 1, 0][c][x, y1, t] == 0
};

solution = NDSolveValue[{equation, conditions},
  c, {x, x0, x1}, {y, y0, y1}, {t, 0, t1},
  Method -> {"MethodOfLines",
  "SpatialDiscretization" -> {"TensorProductGrid",
  "MaxPoints" -> 21}}]

```

```
Manipulate[
  DensityPlot[solution[x, y, t], {x, x0, x1}, {y, y0, y1},
    PlotRange -> {0, 1}, ColorFunction -> "TemperatureMap",
    PlotLabel -> Row[{"t = ", t}], FrameLabel -> {"x", "y"},
    PerformanceGoal -> "Quality"], {{t, 0, "Time"}, 0, t1, 0.001,
  Appearance -> "Labeled"]]
```

```
Manipulate[
  Plot3D[solution[x, y, t], {x, x0, x1}, {y, y0, y1},
    PlotRange -> {0, 1}, AxesLabel -> {"x", "y", "c(x, y, t)"},
    PlotLabel -> Row[{"t = ", t}],
    PerformanceGoal -> "Quality"], {{t, 0, "Time"}, 0, t1, 0.0001,
  Appearance -> "Labeled"]]
```

Информация об авторах

Шалькевич Павел Константинович, кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры информационных технологий в экологии и медицине Международного государственного экологического института имени А. Д. Сахарова Белорусского государственного университета.

Шилов Николай Александрович, ассистент кафедры экономической информатики Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Гринчик Николай Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, ведущий научный сотрудник лаборатории теплофизических измерений Института тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси.

Information about the authors

Pavel K. Shalkevich, Ph. D. (Eng.), Assoc. Prof., Assoc. Prof. of the Department of Information Technologies in Ecology and Medicine of International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University.

Nikolay A. Shilov, Associate of the Department of Economic Informatics, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics.

Nikolay N. Grinchik, D. Sc. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Leading Researcher of the Laboratory of Thermophysical Measurements of the A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National academy of Sciences of Belarus.