

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ НЕСИММЕТРИЧНОГО ВОСПЛАМЕНЕНИЯ  
РЕАГИРУЮЩЕЙ ЖИДКОСТИ  
В УСЛОВИЯХ ЕСТЕСТВЕННОЙ КОНВЕКЦИИ

Э. А. ЗАКАРИН, В. П. КАШКАРОВ, В. Ф. КРАМАР,  
Э. А. ШТЕССЕЛЬ

(Алма-Ата, Москва)

При протекании экзотермических реакций может возникнуть тепловая неустойчивость, приводящая к взрыву. Следует отметить, что классическая теория теплового взрыва [1-3] относится к случаю неподвижных сред. Вместе с тем в процессе теплового воспламенения жидкости или газа возникает гравитационная естественная конвекция, которая может повлиять на протекание экзотермической реакции. Показано, что естественная конвекция, развивающаяся вследствие химического тепловыделения, существенно затрудняет условия симметричного самовоспламенения [4-7].

Несомненный интерес представляет изучение закономерностей воспламенения жидкости при несимметричных граничных условиях по температуре. В этом случае естественная конвекция может возникнуть как за счет внешнего перепада температур, так и за счет химического разогрева вещества. Изучению взаимного влияния естественной конвекции и экзотермической химической реакции при несимметричных граничных условиях по температуре и посвящена данная работа.

Численно исследована задача о воспламенении жидкости в плоском сосуде при наличии тепловой гравитационной конвекции. Температура нижней стенки сосуда больше температуры верхней, боковые стенки теплоизолированы. Нестационарная двумерная система уравнений Навье - Стокса и энергии решалась методом Харлоу - Уэлча с некоторыми модификациями. Определяющие параметры задачи менялись в следующих пределах: число Рэлея  $0 \leq Ra \leq 30\,000$ , число Франк-Каменецкого  $0 \leq Fk \leq 500$ , безразмерный перепад температуры  $2.5 \leq |\theta_0| \leq 15$ .

Проведен анализ режимов стационарного протекания процесса, самовоспламенения, зажигания и переходов между ними. Естественная конвекция ухудшает условия воспламенения, что выражается в увеличении критического числа  $Fk_c$  и времени индукции теплового взрыва  $t_c$ . Получена интерполяционная формула зависимости  $Fk_c$  ( $Ra$ ). Переход от режима самовоспламенения к режиму зажигания в отличие от взрыва в неподвижной среде, происходит скачком с резким уменьшением времени  $t_c$  и перемещением очага воспламенения к горячей стенке. Построено число  $S$ , определяющее соотношение между временами индукции естественной конвекции и теплового взрыва. Условие  $S \approx 1$  является критерием перехода от самовоспламенения к зажиганию.

1. Рассмотрим бесконечно длинную полость квадратного сечения, заполненную химически реагирующей жидкостью. В полости верхняя и нижняя стенки поддерживаются при постоянных температурах  $T_0$  и  $T_1$  соответственно, причем  $T_0 < T_1$ , а боковые считаются теплоизолированными. Скорость экзотермической химической реакции описывается уравнением Аррениуса, преобразованным по методу разложения экспонента [2]. Используя приближение Буссинеска [8] и пренебрегая второстепенными для данной задачи процессами, такими как термодиффузия, диффузионная теплопроводность, выгорание вещества, концентриционная конвекция, запишем моделирующие процесс уравнения с начальными и граничными условиями

$$(1.1) \quad \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

$$(1.2) \quad \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \text{Gr} \left(1 - \frac{\theta}{\theta_0}\right)$$

$$(1.3) \quad \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

$$(1.4) \quad \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial u\theta}{\partial x} + \frac{\partial v\theta}{\partial y} = \frac{1}{\text{Pr}} \left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \text{Fk} \exp \theta \right)$$

$$t=0, 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1: u=v=0, \theta=\theta_0, p=1$$

$$(1.5) \quad t > 0, 0 \leq x \leq 1, y=0: u=v=0, \theta=0; y=1, u=v=0, \theta=\theta_0$$

$$x=0, x=1, 0 \leq y \leq 1: u=v=0, \partial\theta/\partial x=0$$

$$\theta = \frac{E(T - T_1)}{RT_1^2}, \quad \text{Pr} = \frac{\nu}{a}, \quad \text{Gr} = \frac{g\beta(T_1 - T_0)H^3}{\nu^2}$$

$$\text{Fk} = \frac{KH^2}{a} \frac{E}{RT_1^2} \frac{Q}{\rho_0 c} \exp\left(-\frac{E}{RT_1}\right)$$

Здесь  $\text{Pr}$ ,  $\text{Gr}$ ,  $\text{Fk}$  — числа Прандтля, Грасгофа и Франк-Каменецкого,  $H$  — размер стороны сечения полости,  $\theta_0$  — температура холодной стенки,  $K$  — предэкспоненциальный множитель,  $Q$  — удельная теплота реакции. Остальные обозначения общепринятые.

В задаче (1.1)–(1.5) все величины безразмерные. Масштабами времени  $t$ , координат  $x$ ,  $y$ , составляющих вектора скорости  $u$ ,  $v$ , давления  $p$  служат соответственно величины  $H^2/\nu$ ,  $H$ ,  $\nu/H$ ,  $\rho_0 \nu^2/H$ .

2. Решение системы дифференциальных уравнений (1.1)–(1.4) с начальными и граничными условиями (1.5) получено конечно-разностным методом Харлоу–Уэлча [9] (метод «маркеров на сетке» [10]), в котором интегрирование системы уравнений Навье–Стокса для несжимаемой жидкости проводится непосредственно в переменных скорость–давление. Метод был разработан для расчета изотермических течений жидкости, однако он легко обобщается и на случай неизотермических течений.

В алгоритме, при помощи которого решалась задача, разностная аппроксимация уравнений движения (1.1)–(1.3) и соответствующих граничных условий была аналогична аппроксимации, применявшейся в оригинальной работе [9], в частности граничные условия для давления получались из проекции уравнений движения, записанных в векторной форме, на нормаль к твердой поверхности. Для интегрирования уравнения энергии (1.4) была использована схема четвертого порядка точности по пространству (метод построения которой аналогичен использованному в [11]). Граничные условия для температуры также аппроксимировались с четвертым порядком точности по пространству. Таким образом, критические условия воспламенения, зависящие от градиентов температуры, определялись с достаточной степенью точности даже на грубых сетках. Например, сопоставление аналитического и численного решений для случая неподвижной среды дало различие в потоках тепла ~2% на сетке  $10 \times 10$  и 0.5% на сетке  $14 \times 14$ , а различие в величинах  $\text{Fk}$  для одних и тех же тепловых потоков составило для тех же сеток соответственно 1 и 0.3%.

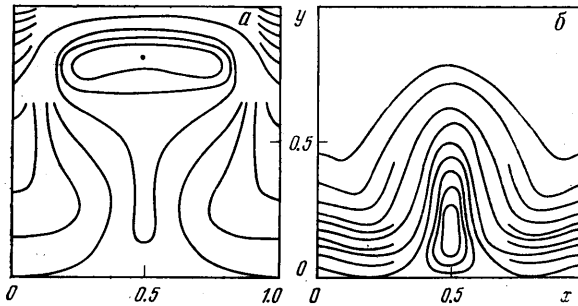
Расчеты полной задачи проводились на сетках  $10 \times 10$ ,  $14 \times 14$  или  $20 \times 20$  в зависимости от сложности выбранного варианта. Начальные условия (1.5) были реализованы следующим образом: температура горячей стенки в начале счета плавно увеличивалась от первоначальной температуры жидкости до заданной величины за небольшой (по сравнению с характерными временами задачи) промежуток времени. Этим достигалось сглаживание температурного скачка в начальных условиях.

Описываемый алгоритм является явным, условно устойчивым, причем его условия устойчивости имеют вид [9, 10]

$$\tau \leq \frac{h}{\sqrt{2(u^2 + v^2)}}, \quad \tau \leq \frac{1}{4} h^2, \quad \tau \leq \frac{1}{\text{Gr}}$$

Эти условия должны выполняться для каждой из точек расчетного поля во все моменты времени. Они налагают жесткие ограничения (в особенности последнее) на шаг по времени  $\tau$ . Поэтому для ускорения счета двухслойная явная схема использовалась только до установления квазистационарного режима, а далее применялась трехслойная схема Дюфорты – Франкля [10], что позволяло существенно (в 3–5 раз) увеличивать шаг по времени при условии медленного изменения искомых переменных. Другие особенности описанного алгоритма изложены в [12].

3. В результате численного счета были получены подробные картины развития и взаимодействия процессов воспламенения и естественной конвекции при  $Pr=10$  и в интервале чисел  $0 \leq Fk \leq 500$ ,  $0 \leq Ra \leq 30\,000$ ,  $2.5 \leq |\theta_0| \leq 15$  ( $Ra = Pr Gr$ ). При вычислениях принималось, что взрыв происходит в тот момент времени, когда максимальная температура в поле



Фиг. 1

течения превышает  $\theta_m$ , которое есть некоторая «достаточно высокая температура, точное значение которой мало влияет на результат» [2, 13]. В задаче полагалось  $\theta_m = 2.0$ .

На фиг. 1 приведены наиболее характерные предвзрывные поля изотерм, полученные при расчетах с различными числами Франк-Каменецкого ( $a - Fk = 80.0$ ,  $t = 7.5$ ;  $b - Fk = 230$ ,  $t = 0.52$ ) и прочих равных условиях:  $Ra = 30\,000$ ,  $\theta_0 = -5.0$ . Изотермы соответствуют значениям температуры  $\theta = -5.0$  (на холодной стенке),  $-4.5$ ,  $-4.0, \dots, +1.5, +2.0$  (в очаге воспламенения).

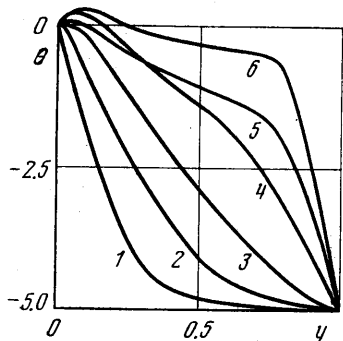
Поле скорости аналогично полученному, например, в [5] и здесь не приводится. Отметим только, что в указанном интервале параметров химическое тепловыделение не изменяет двухвихревой структуры свободноконвективного течения, а влияет только на величину вектора скорости (для фиг. 1,  $a$  максимальная скорость  $v_m = 5.5$ , для фиг. 1,  $b$   $v_m = 17$ ).

В соответствии с классификацией для неподвижных сред [14, 15] в данной задаче также можно выделить три режима протекания процесса: стационарный или квазистационарный режим (I), самовоспламенение (II) и зажигание (III). Типичное для режима II предвзрывное поле температуры представлено на фиг. 1,  $a$ , для режима III — на фиг. 1,  $b$ . Видно, что естественная конвекция оказывает значительное воздействие на процессы теплового взрыва. Особый интерес представляет изучение такого воздействия конвекции на условия перехода от одного режима взрыва к другому.

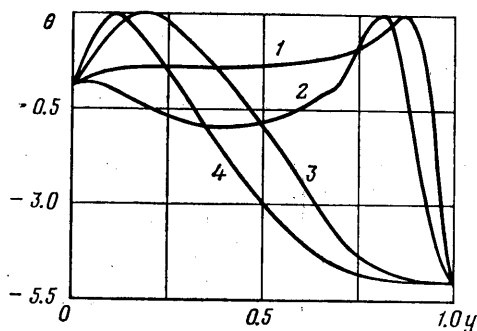
Как показали расчеты, естественная конвекция сильно сдвигает критические условия несимметричного самовоспламенения (которые характеризуются  $Fk_*$ ) в область чисел  $Fk_* > Fk_0$ , где  $Fk_0$  — критическое число Франк-Каменецкого для самовоспламенения неподвижной среды:  $Ra = 0$  (для полубесконечного тела  $Fk_0$  определено в аналитическом виде в [16]). Механизм такого воздействия конвекции на условия взрыва можно проиллюстрировать распределением температуры вдоль вертикальной коор-

динаты в характерном сечении  $x=0.5$  в различные моменты времени (фиг. 2:  $Fk=49$ ,  $Ra=10\ 000$ ,  $\theta_0=-5.0$ ,  $Fk_* = 50$ ,  $Fk_0 = 32.1$ ; кривые 1–6 соответствуют моментам времени  $t=0.2, 0.6, 1.2, 1.6, 2.5, 9.1$ ).

В начале процесса, при  $t \leq 0.6$ , идет кондуктивный прогрев пристенной зоны (кривые 1 и 2). Далее (кривая 3) заметный вклад начинает вносить тепловыделение за счет химической реакции: поток тепла через горячую стенку близок к нулю. В отсутствие естественной конвекции вслед за этим произошел бы взрыв, однако, развиваясь параллельно с описанным процессом, свободноконвективное течение уносит тепло из прогретой зоны



Фиг. 2



Фиг. 3

(кривые 4, 5), в результате чего устанавливается стационарный режим (кривая 6).

Результаты счета по влиянию числа  $Ra$  на критические условия теплового взрыва хорошо описываются формулой

$$\frac{Fk_*}{Fk_0} = 1 + \frac{0.1Ra^{1/2}}{10\ 000 + Ra}$$

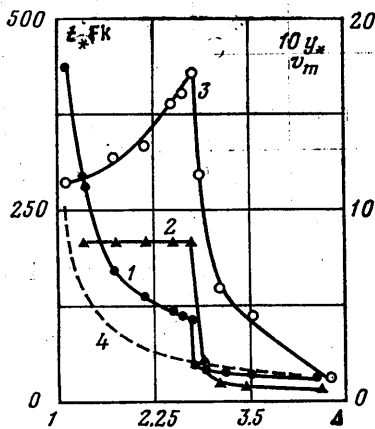
Последняя для чисел  $Ra \geq 100\ 000$ , практически совпадает с интерполяционной формулой из работы [6], обобщающей результаты экспериментальных исследований. Таким образом, расчеты показали, что при учете естественной конвекции в процессах несимметричного самовоспламенения, критические условия теплового взрыва оказываются существенно зависящими от числа  $Ra$ , например отношение  $Fk_*/Fk_0$  увеличивается в 3.5 раза при увеличении числа  $Ra$  от 0 до 30 000.

На фиг. 3 приведены предвзрывные распределения температуры в сечении  $x=0.5$  для различных значений числа  $Fk$ : кривые 1–4 соответствуют значениям  $Fk=140, 220, 230, 250$ . Остальные параметры фиксированы:  $Ra=30\ 000$ ,  $\theta_0=5.0$  и для них  $Fk_* = 80$ ,  $Fk_0 = 23.1$ . Из этой фигуры (кривые 1 и 2) видно, что характерная особенность режима самовоспламенения, отмеченная в [14], еще более выражена в случае самовоспламенения жидкости: подводимое извне и выделившееся в результате реакции тепло распределяется по всему реагирующему объему (см. также фиг. 1а) и система прогревается до температур, близких к температуре нагретой стенки полости. В этом режиме конвективный теплоперенос приводит к тому, что наиболее благоприятные условия воспламенения возникают вблизи холодной стенки (по крайней мере, для двухвихревой структуры свободноконвективного течения).

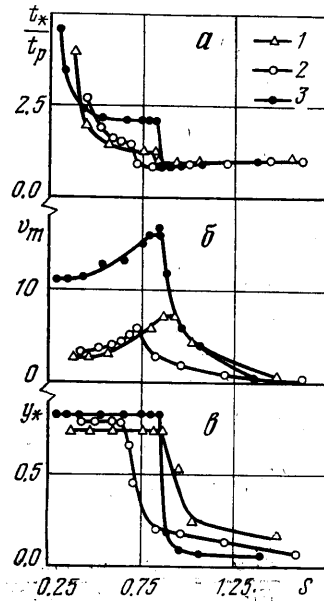
Кривые 3 и 4 на фиг. 3 соответствуют режиму III, при котором подводимое тепло не успевает распределиться по всему объему и вблизи нагретой стенки возникает интенсивная реакция, приводящая к взрыву [13]. Конвективные ячейки в режиме III по сравнению с режимом II несколько

сдвигаются к горячей стенке, а их влияние выражается в том, что очаг зажигания образуется в районе  $x=0.5$ ,  $y \leq 0.2$  (фиг. 1, б).

На фиг. 4 приведены зависимости времени индукции теплового взрыва  $t_*$  (кривая 1), координаты точки взрыва  $y_*$  (кривая 2) и максимальной подъемной скорости течения  $v_m$  (кривая 3) от степени удаления от предела теплового взрыва  $\Delta = Fk/Fk_*$ . Параметры  $Ra$  и  $\theta_0$  такие же, как на фиг. 3. Сопоставление линии 4, которая соответствует  $t_*$  при  $Ra=0$ , и кривой 1 показывает, что естественная конвекция в режиме II существенно увеличивает время индукции теплового взрыва, а в режиме III несколько



Фиг. 4



Фиг. 5

уменьшает это время. Последнее качественно согласуется с выводами приближенного анализа работы [17].

Свободноконвективное движение вносит значительные изменения в закономерности перехода от режима II к режиму III. Этот переход в отличие от воспламенения в неподвижной среде характеризуется резким, почти скачкообразным изменением  $t_*$ ,  $y_*$  и  $v_m$  (фиг. 4). Переходные состояния между самовоспламенением и зажиганием при  $Ra=30\,000$  практически не реализуются (см. фиг. 3 кривые 2 и 3).

Из физических соображений ясно, что указанный переход II—III должен определяться соотношением между характерными временами развития естественной конвекции  $t_k$  и химической реакции  $t_p$ . Соответствующий критерий  $S=t_k/t_p$  строился по исходным параметрам задачи ( $Ra$ ,  $Pr$ ,  $\theta_0$ ,  $Fk$ ) следующим образом.

В качестве характерного времени  $t_k$  был выбран период индукции естественной конвекции, определенный из опытных данных в виде [18]

$$t_k = 70Ra^{-2/3}Pr^{1/6}$$

Эта формула при  $Ra \geq 10\,000$ ,  $Pr \geq 10$ . Поскольку конвекция конкурирует с процессом зажигания, за характерное время химической реакции было выбрано время задержки зажигания в неподвижной полубесконечной среде. Последнее в диапазоне  $5 \leq |\theta_0| \leq 30$  определяется следующей интерполяционной формулой [13]:  $t_p = 0.2|\theta_0|(|\theta_0|+8)Pr/Fk$ , которая дает хорошие результаты для слоя конечной толщины, если  $Fk \geq 2Fk_*$ . Таким об-

разом, выражение числа  $S$  для случая воспламенения при естественной конвекции имеет вид

$$S = \frac{350Fk}{Ra^{1/2} Pr^{1/4} |\theta_0| (|\theta_0| + 8)}$$

Анализ результатов выполненных расчетов с помощью предложенного числа  $S$  приведен на фиг. 5, где изображены зависимости времени индукции теплового взрыва (фиг. 5, а), максимальной подъемной скорости течения (фиг. 5, б) и вертикальной координаты точки взрыва (фиг. 5, в) от числа  $S$  (кривые 1— $Ra=10\,000$ ,  $\theta_0=-2.5$ ; кривые 2— $Ra=10\,000$ ,  $\theta_0=-5.0$ ; кривые 3— $Ra=30\,000$ ,  $\theta_0=-5.0$ ). Из фигуры видно, что переход II—III осуществляется при  $S=0.7\div 0.95$  и с ростом  $Ra$  становится более резким. Наблюдаемый разброс требует дальнейших тщательных исследований и делать на его основе какие-либо физические выводы преждевременно. Для практических целей можно считать, что переход от несимметричного самовоспламенения к зажиганию в условиях естественной конвекции происходит при  $S=1$ .

Авторы благодарны А. Г. Мержанову за ценные советы и замечания, высказанные при обсуждении работ.

Поступила 14 III 1978

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Семенов Н. Н. Цепные реакции. Л. Госхимтехиздат, 1934.
2. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М., «Наука», 1967.
3. Мержанов А. Г., Дубовицкий Ф. И. Современное состояние теории теплового взрыва. Успехи химии, 1966, т. 35, вып. 4.
4. Мержанов А. Г., Штессель Э. А. Тепловой взрыв в жидкой фазе при наличии естественной конвекции. Докл. АН СССР, 1970, т. 194, № 1.
5. Штессель Э. А., Прибыткова К. В., Мержанов А. Г. Численное решение задачи о тепловом взрыве с учетом свободной конвекции. Физ. горения и взрыва, 1971, т. 7, № 2.
6. Jones D. R. The dynamic stability of confined exothermically reacting fluids. Int. J. Heat Mass Transfer, 1973, vol. 16, No. 1.
7. Прибыткова К. В., Худяев С. И., Штессель Э. А. Исследование теплового самовоспламенения в условиях естественной конвекции. В сб. «Тепломассообмен—5». Материалы V Всесоюзной конференции по тепломассообмену, т. 2. Минск, 1976.
8. Гершуни Г. З. Жуховицкий Е. М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М., «Наука», 1972.
9. Harlow F. H., Welch T. E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. Phys. Fluids, 1965, vol. 8, No. 12.
10. Potter D. Computational physics. London, a. o., Wiley, 1973; (Русск. перев.: Вычислительные методы в физике. М., «Мир», 1975).
11. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений, т. 2. М., Физматгиз, 1962.
12. Закарин Э. А., Кашкаров В. П., Крамар В. Ф. К численному расчету процессов зажигания в замкнутом объеме в условиях естественной конвекции. В сб. Прикладная и теоретическая физика. Казахск. ун-т, Вып. 9, 1977.
13. Merzhanov A. G., Averson A. E. The present state of the thermal ignition theory: an invited review. Combustion and Flame, 1971, vol. 16, No. 1. (Русск. перев.: Современное состояние тепловой теории зажигания. Черноголовка, АН СССР, Ин-т хим. физики, 1970).
14. Абрамов В. Г., Гонтьковская В. Т., Мержанов А. Г. К теории теплового воспламенения. Сообщ. I. Закономерности перехода от самовоспламенения к зажиганию. Изв. АН СССР, Сер. хим., 1966, № 3.
15. Мержанов А. Г., Абрамов В. Г., Гонтьковская В. Т. О закономерностях перехода от самовоспламенения к зажиганию. Докл. АН СССР, 1963, т. 148, № 1.
16. Зельдович Я. Б. Теория зажигания накаливаемой поверхностью. ЖЭТФ, 1939, т. 9, № 12.
17. Штессель Э. А., Аверсон А. Э., Прибыткова К. В. О влиянии естественной конвекции на зажигание жидких систем. В сб. «Горение и взрыв». М., «Наука», 1972.
18. Мержанов А. Г., Штессель Э. А. Возникновение и развитие тепловой конвекции в слое вязкой жидкости. Докл. АН СССР, 1970, т. 191 № 4.