

УДК 532.517.4:536.25

КОНВЕКЦИЯ РЭЛЕЯ — БЕНАРА В ХИМИЧЕСКИ РАВНОВЕСНОМ ГАЗЕ ПРИ НАЛИЧИИ ХИМИЧЕСКИ ИНЕРТНЫХ МИКРОЧАСТИЦ

И. Б. Палымский¹, П. А. Фомин²

¹Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, 630102 Новосибирск
palymsky@yandex.ru

²Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск

Предложена физико-математическая модель конвекции Рэлея — Бенара в химически равновесном газе при наличии химически инертных микрочастиц (Al_2O_3). Проведен линейный анализ конвекции в приближении Буссинеска. Показано, что добавление химически инертных микрочастиц увеличивает критическое значение числа Рэлея и повышает устойчивость конвективного процесса. Таким образом, на примере химически равновесного газа показана возможность использования химически инертных микрочастиц для управления и контроля конвекции в химически реагирующем газе.

Ключевые слова: конвекция Рэлея — Бенара, химическое равновесие, микрочастицы, критическое число Рэлея, конвективная устойчивость.

DOI 10.15372/FGV20180405

ВВЕДЕНИЕ

В работах [1–3] рассмотрена конвекция Рэлея — Бенара в химически реагирующем газе, находящемся в состоянии химического равновесия. Термодинамические параметры газа рассчитывались по высокоточной приведенной модели химического равновесия [4–6]. Принципиальной особенностью рассматриваемого процесса по сравнению с конвекцией химически инертного газа является немонотонная (с четким локальным максимумом) зависимость коэффициента теплового расширения газа от температуры. Причем его значение для химически равновесного газа может быть в несколько раз выше, чем для химически инертного газа. Такие особенности рассматриваемого коэффициента приводят к существенной интенсификации конвекции химически равновесного газа по сравнению с конвективным процессом в химически инертном газе.

Добавление в газ химически инертных микрочастиц меняет термодинамические параметры химически равновесной газовой смеси [7, 8], что, естественно, должно повлечь изменение количественной и качественной картины

конвективного потока: переход от одного режима конвекции к другому, изменение числа Нуссельта и критического числа Рэлея. Таким образом, следует ожидать, что впрыск химически инертных частиц может служить эффективным способом управления конвективным процессом, предотвращать (или, наоборот, возбуждать) развитие неустойчивостей и менять коэффициент теплоотдачи, что представляет как научный интерес, так и практический при конструировании химических реакторов и теплообменников. По сути дела, массовая доля конденсированной фазы дает дополнительную степень свободы в таком многопараметрическом явлении, как конвекция химически равновесного газа.

К сожалению, вопрос о влиянии химически инертных частиц на конвекцию химически реагирующего газа до сих пор остается открытым. Цель настоящей работы состоит в разработке физико-математической модели конвекции Рэлея — Бенара химически равновесного газа при наличии химически инертных микрочастиц, проведении линейного анализа устойчивости конвекции в приближении Буссинеска и анализа влияния микрочастиц на параметры и устойчивость рассматриваемого конвективного процесса.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 17-58-53100).

ХИМИЧЕСКОЕ РАВНОВЕСИЕ В СМЕСИ ГАЗА С ЧАСТИЦАМИ

Химическое равновесие в смеси газа с химически инертными частицами будем описывать по модели, предложенной в [7, 8]. Полагаем, что химически инертные частицы находятся в тепловом и механическом равновесии с газом, т. е. в любой момент времени имеют одинаковую с ним температуру и скорость. Подобные предположения заведомо выполняются для частиц микронных размеров ($1 \div 10$ мкм [7, 8]). Объемная концентрация инертных частиц пренебрежимо мала, что имеет место при массовой концентрации конденсированной фазы $\alpha < 90$ %.

Для плотности смеси ρ_m , плотности газа ρ и объемной плотности частиц ρ_p справедливы соотношения

$$\rho + \rho_p = \rho_m, \quad \rho = (1 - \alpha)\rho_m, \quad \rho_p = \alpha\rho_m.$$

Здесь α — массовая концентрация химически инертных микрочастиц. Везде в статье параметры газовой смеси с частицами будем обозначать индексом m , а частиц — индексом p .

Химическая инертность частиц и их большой (по сравнению с длиной свободного пробега молекул) размер позволяют считать, что конденсированная фаза не влияет на химические процессы в газе. Газовая фаза полагается идеальной:

$$\rho = p\mu/RT,$$

где p — давление, μ — молярная масса, R — универсальная газовая постоянная, T — температура. Молярная масса газа рассчитывается по формуле

$$\mu = \frac{1}{2(B-1)} [B\mu_{\min} - 2\mu_{\max} + ((B\mu_{\min} - 2\mu_{\max})^2 + 4(B-1)\mu_{\max}^2)^{0.5}], \quad (1)$$

$$B = \frac{AT^{0.75}}{4K_+} \times \left[1 - \exp\left(-\frac{\Theta}{T}\right) \right]^{1.5} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \frac{\mu_{\max}^2}{\mu_{\min}\rho}.$$

Здесь E — средняя энергия диссоциации обобщенных продуктов реакции, Θ — эффективная температура возбуждения колебательных степеней свободы молекул, K_+ — константа

скорости рекомбинации обобщенных продуктов реакций, A — константа скорости диссоциации обобщенных продуктов реакций, μ_{\min} и μ_{\max} — молярные массы газа в предельно диссоциированном и предельно рекомбинированном состояниях. Молярная масса может варьироваться в пределах $\mu_{\min} \leq \mu \leq \mu_{\max}$, при этом $\mu \rightarrow \mu_{\max}$ с уменьшением температуры и $\mu \rightarrow \mu_{\min}$ при ее увеличении.

Полагаем, что внешнее давление газовой смеси постоянно. Тогда из уравнения состояния идеального газа и (1) следует, что плотность реагирующего газа зависит только от абсолютной температуры.

Достоинствами используемой модели химического равновесия [7, 8] являются простота, высокая точность и согласованность со вторым началом термодинамики. Модель позволяет учесть существенное изменение молярной массы, теплового эффекта, теплоемкостей и показателя адиабаты вследствие сдвига химического равновесия. Все константы модели имеют ясный физический смысл.

Рассмотрим стехиометрическую водородокислородную смесь. Константы модели химического равновесия для нее равны: $\Theta = 4000$ К, $A = 5.1 \cdot 10^{10}$ м³/(кмоль \cdot с \cdot К^{3/4}), $E = 459.2$ кДж/моль, $K_+ = 6 \cdot 10^8$ м⁶/(кмоль² \cdot с), $\mu_{\min} = 6$ кг/кмоль, $\mu_{\max} = 18$ кг/кмоль [4–8].

Коэффициент теплового расширения β может быть определен по плотности или молярной массе:

$$\begin{aligned} \beta &= -\frac{1}{\rho_m} \frac{\partial \rho_m}{\partial T} = \\ &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} = -\frac{d}{dT} \ln \frac{\mu}{T} = \frac{1}{T} - \frac{1}{\mu} \frac{d\mu}{dT}. \end{aligned}$$

Отметим, что отсюда при постоянной молярной массе μ (для химически инертной среды) можно найти коэффициент теплового расширения как $\beta = 1/T$.

На рис. 1–7 представлены результаты расчетов при $p = 1$ атм.

На рис. 1 и 2 показаны молярная масса $\mu = \mu(T)$ и плотность газа $\rho = \rho(T)$, а также асимптотические кривые, соответствующие полностью рекомбинированному и диссоциированному состояниям. Наблюдается достаточная точность асимптотических кривых при относительно малой и высокой температурах.

На рис. 3 приведены коэффициент теплового расширения $\beta = \beta(T)$ и асимптотика $\beta =$

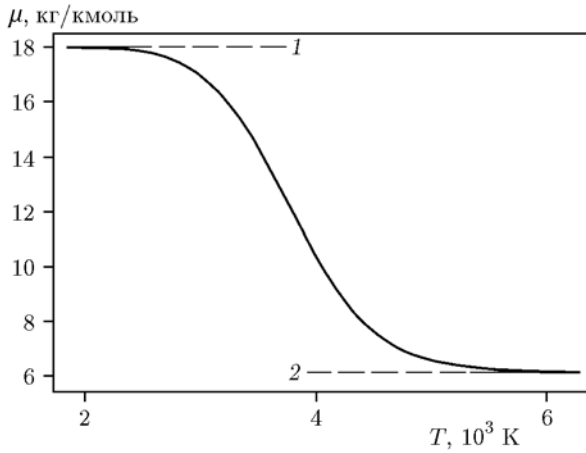


Рис. 1. Молярная масса газа (сплошная линия): штриховые линии: 1 — $\mu = \mu_{\max}$, 2 — $\mu = \mu_{\min}$

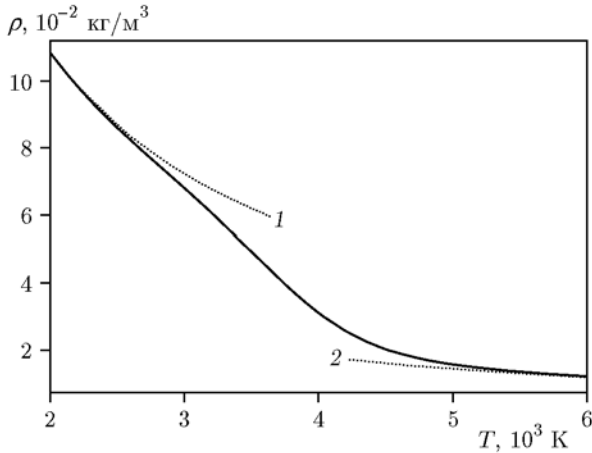


Рис. 2. Плотность реагирующего газа (сплошная линия): пунктирные линии: 1 — $\rho_1 = \mu_{\max} p / (RT)$, 2 — $\rho_2 = \mu_{\min} p / (RT)$

$1/T$ (химически инертный газ) с близкими значениями при $T \leq 2000$ К и $T \geq 6000$ К. Видно, что коэффициент теплового расширения имеет локальный максимум, который в 3.91 раза больше значения для химически инертной среды.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВИЖЕНИЯ СМЕСИ

Как и в работах [1–3, 9], будем рассматривать конвективное двумерное и нестационарное течение вязкой несжимаемой жидкости в горизонтальном слое при подогреве снизу в приближении Буссинеска. Границы слоя пред-

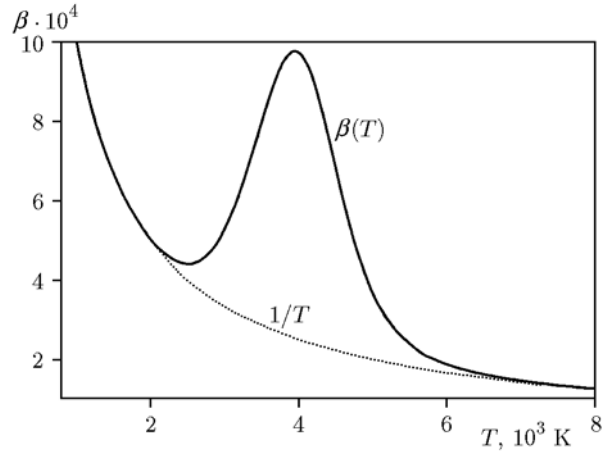


Рис. 3. Коэффициент теплового расширения смеси

полагаются изотермическими и свободными от касательных напряжений.

Рассуждая по аналогии с [9, 10], получим в приближении Буссинеска для конвекции несжимаемого реагирующего газа с инертными микрочастицами следующую систему уравнений, записанную в отклонениях от равновесного решения (нулевая скорость и линейный профиль температуры):

$$\begin{aligned} \omega_t + \frac{1}{\text{Pr}} (\psi_y \omega_x - \psi_x \omega_y) &= \Delta \omega + C \text{Ra} Q_x, \\ \Delta \psi &= -\omega, \\ Q_t + \frac{1}{\text{Pr}} (\psi_y Q_x - \psi_x Q_y) &= \\ &= \frac{1}{C_1 \text{Pr}} \Delta Q - \frac{1}{\text{Pr}} \psi_x, \end{aligned} \quad (2)$$

$$C = \frac{\beta(T)}{\beta_{in}(T)} = \beta(T)T, \quad C_1 = \frac{c_p(\alpha)}{c_p(0)}.$$

Здесь $Q_x = \frac{\partial Q}{\partial x}$, $Q_y = \frac{\partial Q}{\partial y}$, $\Delta Q = \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Q}{\partial y^2}$,

$\text{Ra} = \frac{gH^3 \delta T}{T \chi \nu}$ и $\text{Pr} = \frac{\nu}{\chi}$ — числа Рэлея и Прандтля, Q — отклонение температуры, c_p — удельная теплоемкость при постоянном давлении. В качестве характерной длины выбрана толщина слоя H , времени — H^2/ν , скорости — χ/H , давления — $\rho \nu \chi / H^2$, температуры — $\delta T = T_h - T_c$. Здесь χ и ν — постоянные значения температуропроводности и кинематической вязкости, g — ускорение свободного падения, T_h , T_c — температуры нижней горячей и верхней холодной горизонтальных границ. Функция тока ψ и вихрь ω определены

формулами $u = \psi_y$, $v = -\psi_x$ и $\omega = v_x - u_y$ по полям горизонтальной u и вертикальной v скоростей [10].

При выводе системы (2) учтено, что согласно кинетической теории вязкость и теплопроводность газа прямо пропорциональны его плотности и что удельная теплоемкость рассматриваемой смеси существенным образом зависит от массовой концентрации частиц α [7, 8].

Интенсивность силы плавучести определяется произведением $C\text{Ra}$. При этом число Рэлея есть отношение силы плавучести к силе вязкости и определяется степенью подогрева, а безразмерный множитель C определяется процессами рекомбинации и диссоциации.

Фактически множитель C есть относительный коэффициент теплового расширения, т. е. коэффициент теплового расширения реагирующей равновесной газовой смеси, отнесенный к соответствующему значению для инертного газа. Множитель C_1 представляет собой относительную теплоемкость, т. е. теплоемкость газа с частицами при массовой концентрации α , отнесенной к значению теплоемкости газа без частиц. Оба параметра безразмерные.

Формулы для вычисления $c_p(\alpha)$ можно найти в [7, 8], в данной работе из-за громоздкости они не приводятся. Для вычисления теплоемкости конденсированной фазы (оксида алюминия Al_2O_3) использовалась аппроксимационная формула, полученная на основании данных [11, 12]:

$$U_T^C = (-0.063T + 6.06\sqrt{T}) \frac{10^3}{102} \text{ Дж}/(\text{К} \cdot \text{кг}).$$

На рис. 4 приведена зависимость $C(T)$. В области $2500 \leq T \leq 6000$ К наблюдается заметная интенсификация конвективной неустойчивости (максимум зависимости соответствует $T \approx 4053$ К).

Если $\alpha \neq 0$, то характеристики конвективной устойчивости зависят от удельной теплоемкости газовой смеси и тем самым являются функциями α .

На рис. 5 приведен множитель $C_1 = c_p(\alpha)/c_p(0)$ как функция T . Видно, что относительная теплоемкость с ростом массовой концентрации микрочастиц α уменьшается. Последнее представляется естественным с физической точки зрения, так как микрочастицы Al_2O_3 тяжелее газовой среды и имеют меньшую теплоемкость. Зависимость относитель-

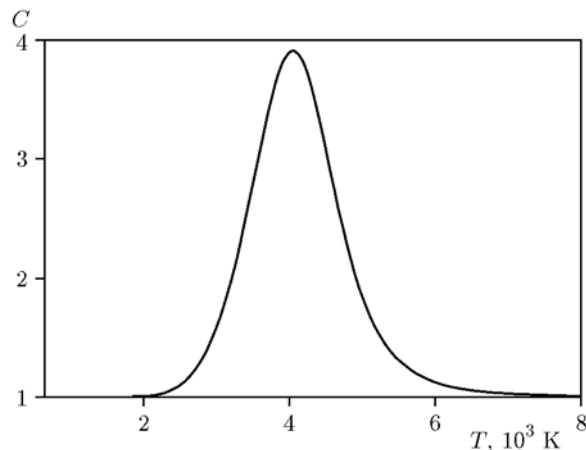


Рис. 4. Множитель $C = C(T)$ в системе (2)

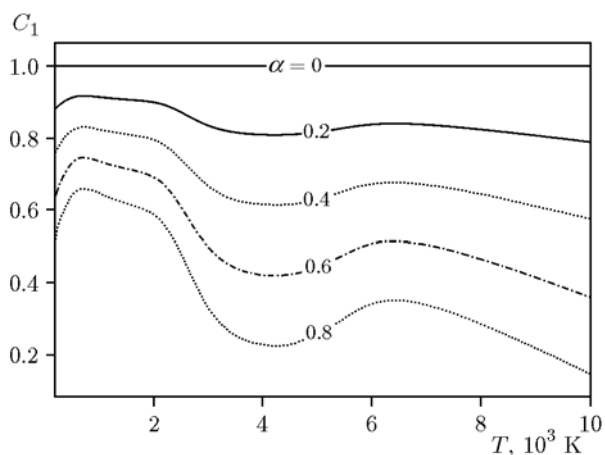


Рис. 5. Множитель $C_1 = C_1(\alpha)$ в системе (2)

ной теплоемкости от массовой концентрации частиц имеет три локальных минимума. Низкотемпературный экстремум не реализуется из-за нефизично низких температур, а относительно малые значения относительной теплоемкости при высокой температуре обуславливают усиленное подавление конвективной неустойчивости.

ЛИНЕЙНЫЙ АНАЛИЗ

Рассмотрим линейный аналог системы (2):

$$\omega_t = \Delta\omega + C\text{Ra}Q_x,$$

$$\Delta\psi = -\omega, \quad (3)$$

$$Q_t + \frac{1}{\text{Pr}} (\psi_y Q_x - \psi_x Q_y) = \frac{1}{C_1 \text{Pr}} \Delta Q - \frac{1}{\text{Pr}} \psi_x$$

и семейство решений системы (3):

$$\begin{aligned}\omega(t, x, y) &= \Omega \exp(-\lambda t) \cos(\alpha_x x) \sin(m\pi y), \\ \psi(t, x, y) &= \Omega \exp(-\lambda t) \cos(\alpha_x x) \sin(m\pi y)/S, \\ Q(t, x, y) &= \Theta \exp(-\lambda t) \sin(\alpha_x x) \sin(m\pi y), \quad (4) \\ S &= \alpha_x^2 + m^2\pi^2.\end{aligned}$$

Здесь λ — собственное значение, где $\lambda > 0$ соответствует затуханию, а $\lambda < 0$ — нарастанию амплитуд гармонических решений, α_x и m — волновые числа в горизонтальном и вертикальном направлениях, Ω и Θ — постоянные.

Подставляя (4) в (3), после стандартных вычислений [9, 10] находим

$$\begin{aligned}\lambda_{1,2} &= \frac{S}{2} \left(1 + \frac{1}{C_1 \text{Pr}} \right) \pm \\ &\pm \sqrt{\frac{S^2}{4} \left(1 - \frac{1}{C_1 \text{Pr}} \right)^2 + \frac{C \text{Ra} \alpha^2}{S \text{Pr}}}, \quad (5)\end{aligned}$$

где, как и выше, $S = \alpha^2 + m^2\pi^2$.

Ограничивая дальнейшее рассмотрение случаем, соответствующим знаку минус в соотношении (5) и полагая инкремент λ равным нулю, определяем число Рэлея, соответствующее нейтральной кривой:

$$\text{Ra} = (m^2\pi^2 + \alpha^2)^3 / (C C_1 \alpha^2).$$

Критическое значение числа Рэлея (минимум по α при $m = 1$) можно найти как

$$\text{Ra}_{cr} = \frac{27}{4CC_1} \pi^4 = \frac{657.511}{CC_1}, \quad \alpha_{cr} = 2.221.$$

Числитель последней дроби 657.511 есть критическое число Рэлея для конвекции в химически инертной среде [9], умножение знаменателя на C обусловлено протеканием химических реакций, а на C_1 — добавлением химически инертных микрочастиц. Если $C \approx 1$ и $C_1 \approx 1$ (малая концентрация частиц при низкой или высокой температуре), то $\text{Ra}_{cr} = 657.511(3 - C - C_1)$.

Рис. 6 представляет критическое число Рэлея как функцию абсолютной температуры при различных значениях α . На рис. 7 точками нанесены результаты расчета критического числа Рэлея (минимум по T) как функции α . Видно, что протекающие химические реакции понижают критическое число Рэлея

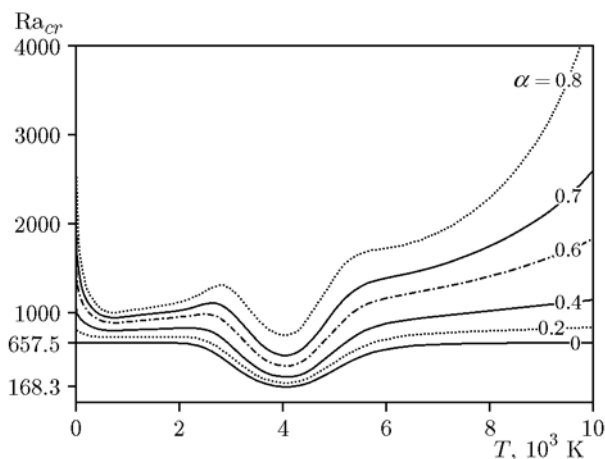


Рис. 6. Нейтральная кривая $\text{Ra}(T)$

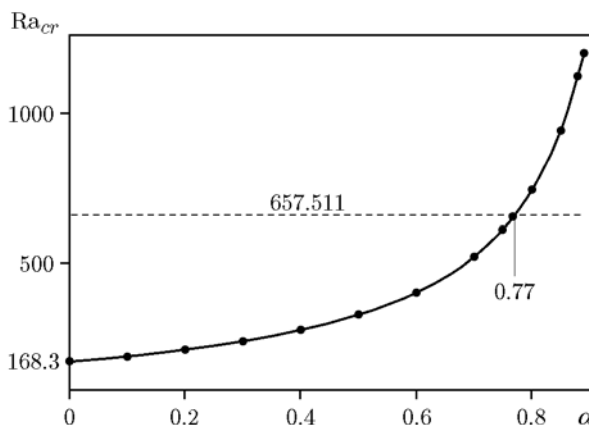


Рис. 7. Критическое число Рэлея

по сравнению с его значением для химически инертной среды, однако при добавлении химически инертных микрочастиц нейтральная кривая монотонно сдвигается вверх с увеличением критического числа Рэлея, достигая при $\alpha = 0.77$ критического значения Ra для инертной среды.

Во всем исследованном диапазоне массовой концентрации критическое число Рэлея с хорошей точностью может быть вычислено по простой формуле, полученной аппроксимацией расчетных данных методом наименьших квадратов (сплошная линия на рис. 7):

$$\text{Ra}_{cr} = 168.43 / (1 - 0.96613\alpha)$$

и

$$\text{Ra}_{cr} = 168.43 + 162.73\alpha \text{ при } 0 \leq \alpha < 0.2.$$

На рис. 8 показан инкремент нарастания возмущений λ как функция горизонтального

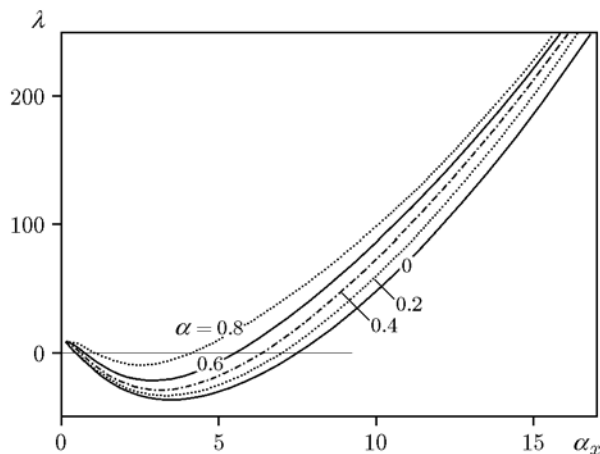


Рис. 8. Инкремент нарастания возмущений при $m = 1$, $Ra = 2 \cdot 657.5 = 1315$, $Pr = 0.71$, $p = 1$ атм и $T = 4053$ К

волнового числа при $m = 1$, $Ra = 2 \cdot 657.5 = 1315$, $Pr = 0.71$, $p = 1$ атм и $T = 4053$ К и различных значениях α . Видно, что при добавлении инертных микрочастиц (с ростом α) соответствующие кривые сдвигаются вверх, при этом диапазон неустойчивости по горизонтальному волновому числу уменьшается с увеличением устойчивости равновесного режима конвекции.

Рассмотрим возможность управления интенсивностью конвективных процессов путем изменения давления и температуры. В этой связи отметим очень слабую зависимость критического числа Рэлея от внешнего давления [1, 2]. Большей частью устойчивость конвекции определяется температурой, причем имеется диапазон температуры, в котором химические реакции значительно понижают устойчивость течения (см. рис. 4 и 6 при $\alpha = 0$). В то же время добавление в реагирующую смесь инертных микрочастиц существенным образом повышает устойчивость течения (см. рис. 6–8).

Известно, что любое изменение давления и/или температуры влечет нарушение химического равновесия, которое затем восстанавливается. В рамках данной работы восстановление химического равновесия полагается мгновенным. В этой связи необходимо сравнить характерные времена конвективного процесса и восстановления химического равновесия после малых возмущений параметров системы, чтобы убедиться, что второе из них существенно меньше первого. В противном случае данная статья теряет смысл.

Характерное время конвекции может быть оценено через характерную ширину H и кинематическую вязкость ν как H^2/ν . Для получения оценки по порядку величины рассмотрим воздух. То обстоятельство, что по кинетической теории газа кинематическая вязкость определяется только температурой и давлением, позволяет не учитывать наличие инжектированных микрочастиц. Проводя оценки [3], получаем, что при $T = 3000$ К и $p = 1$ атм характерные времена конвекции и восстановления химического равновесия равны 14 и 10^{-4} с соответственно. Таким образом, предположение данной работы о мгновенном восстановлении химического равновесия вполне обосновано.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена новая физико-математическая модель конвективных течений химически активного равновесного газа с инертными микрочастицами. Течение рассматривается в горизонтальном слое при подогреве снизу, газ считается вязким и несжимаемым, а конвективное течение — двумерным и нестационарным, границы слоя изотермические и свободные от касательных напряжений. Термодинамические параметры газа при химическом равновесии рассчитываются по предложенной ранее модели химического равновесия.

Показано, что учет процессов рекомбинации и диссоциации приводит к появлению дополнительного множителя $C = C(T)$ (относительного коэффициента теплового расширения) при числе Рэлея в системе уравнений, соответствующем описанию конвекции. Наличие микрочастиц обуславливает появление множителя (обратной относительной теплоемкости) для теплопроводности.

Приведены результаты линейного анализа устойчивости конвективного течения. В частности, для химически активного газа с инертными микрочастицами в состоянии химического равновесия получены выражения для инкрементов нарастания бесконечно малых возмущений и для критического числа Рэлея.

Отметим сосуществование двух противоречивых тенденций. С одной стороны, протекающие химические реакции обуславливают фактическое повышение значения числа Рэлея (надкритичности), понижение его критического значения и увеличение конвективной неустойчивости. С другой стороны, добавление в реагирующую смесь инертных микро-

частиц уменьшает удельную теплоемкость и, как следствие, увеличивает критическое значение числа Рэлея, повышая тем самым конвективную устойчивость течения. Таким образом, на примере химически равновесного газа показана возможность использования химически инертных микрочастиц для управления и контроля конвекции в химически реагирующем газе. Известно, что формирование и развитие дефлаграционных процессов в газовых смесях, находящихся в сосудах большого объема, неразрывно связано с конвекцией. Поэтому полученные в данной работе результаты по ослаблению конвективных процессов химически инертными частицами могут быть полезны для решения вопросов взрывобезопасности газовых систем.

Сравнение характерных времен конвективного процесса и восстановления химического равновесия после малых возмущений параметров системы, показало, что второе из них существенно меньше первого. Это подтверждает предположение данной работы о мгновенном восстановлении химического равновесия.

ЛИТЕРАТУРА

1. Palymskiy I. V., Fomin P. A., Hieronymus H. The Rayleigh — Benard convection in gas with chemical reactions // Сиб. журн. вычислит. математики. — 2007. — Т. 10, № 4. — С. 371–383.
2. Palymskiy I. V., Fomin P. A., Hieronymus H. Rayleigh — Benard convection in a chemical equilibrium gas (simulation of surface detonation wave initiation) // Appl. Math. Model. — 2008. — V. 32, N 5. — P. 660–676.
3. Палымский И. Б., Палымский В. И., Фомин П. А. Конвекция Рэлея — Бенара в химически активном газе, находящемся в состоянии химического равновесия // Физика горения и взрыва. — 2017. — Т. 53, № 2. — С. 3–14.
4. Николаев Ю. А., Фомин П. А. О расчете равновесных течений химически реагирующих газов // Физика горения и взрыва. — 1982. — Т. 18, № 1. — С. 66–72.
5. Николаев Ю. А., Фомин П. А. Приближенное уравнение кинетики в гетерогенных системах типа газ - конденсированная фаза // Физика горения и взрыва. — 1983. — Т. 19, № 6. — С. 49–58.
6. Николаев Ю. А., Зак Д. В. Согласование моделей химических реакций в газах со вторым началом термодинамики // Физика горения и взрыва. — 1988. — Т. 24, № 4. — С. 87–90.
7. Fomin Pavel A., Chen Jenq-Renn. Effect of chemically inert particles on thermodynamic characteristics and detonation of a combustible gas // Combust. Sci. Technol. — 2009. — V. 181, N 8. — P. 1038–1064.
8. Федоров А. В., Фомин П. А., Фомин В. М., Тропин Д. А., Чен Дж.-Р. Физико-математическое моделирование подавления детонации облаками мелких частиц. — Новосибирск: НГАСУ, Сибстрин, 2011.
9. Палымский И. Б. Турбулентная конвекция Рэлея — Бенара. Численный метод и результаты расчетов. — Германия: LAP, 2011.
10. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. — М.: Наука, 1972.
11. Термические константы веществ / под ред. В. П. Глушко. — М.: ВИНТИ, 1965–1982.
12. Таблицы физических величин / под ред. И. К. Кикоина. — М.: Атомиздат, 1976.

Поступила в редакцию 29/VI 2017 г.