

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ КОНВЕКЦИИ В РЕАГИРУЮЩИХ ГАЗОВЫХ СМЕСЯХ

В.И. Палымский, И.Б. Палымский, П.А. Фомин, И.В. Фролов

*Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева
630090, Новосибирск, Российская Федерация*

Конвекция Релея-Бенара – классическая область науки, где разработана основанная на приближении Буссинеска математическая модель и численные методы [1-3]. Основное внимание уделялось моделированию конвекции химически инертных газов. Но, конвективные процессы имеют место и в химически реагирующих газах, например, при сгорании газовых смесей в промышленных реакторах, технических устройствах и экспериментальных установках. Если характерное время протекания химической реакции существенно меньше характерного времени конвективного процесса, то конвекция протекает как химически равновесная.

Температурный коэффициент расширения среды β определяет качественную и количественную картину конвекции, в случае химически инертного газа β монотонен и обратно пропорционален температуре, а с учетом химических реакций – немонотонен с четким локальным максимумом и обратно пропорционален температуре асимптотически при достаточно низкой и высокой температурах [2]. При невысокой надкритичности конвекция развивается как валиковая квазидвумерная [3] и это дает основание для двумерного подхода на первом этапе исследования.

В работе [2] впервые сформулирована и численно решена двумерная задача о конвекции Релея-Бенара в газе в состоянии химического равновесия. Плотность ρ и молярная масса μ газа рассчитывались по предложенной ранее модели химического равновесия [4]:

$$\rho = \frac{P\mu}{RT}, \quad \mu = \frac{B\mu_{\min} - 2\mu_{\max} + ((B\mu_{\min} - 2\mu_{\max})^2 + 4(B-1)\mu_{\max}^2)^{0.5}}{2(B-1)},$$
$$B = \frac{AT^{0.75}}{4K_+} \cdot (1 - \exp(-\Theta/T))^{1.5} \exp(-E/RT) \frac{\mu_{\max}^2}{\mu_{\min}\rho}.$$

Согласно этой модели, плотность газа есть функция абсолютной температуры T и давления P . В данной работе давление в уравнении состояния считается постоянным и, таким образом, плотность ρ и $\beta = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T}$ зависят только от температуры. Здесь A – скорость

диссоциации, K_+ – скорость рекомбинации, Θ – эффективная температура возбуждения колебательных степеней свободы в молекулах, E – средняя энергия диссоциации продуктов реакций и R – универсальная газовая постоянная.

В приближении Буссинеска конвекция описывается системой уравнений (1) для отклонений функции тока ψ , вихря ω и температуры от равновесного решения [2]:

$$\begin{aligned} \omega_t + \frac{1}{Pr} (\varphi_y \omega_x - \varphi_x \omega_y) &= \Delta \omega + C(T) \cdot Ra Q_x, \quad \Delta \varphi = -\omega, \\ Q_t + \frac{1}{Pr} (\varphi_y Q_x - \varphi_x Q_y) &= \frac{1}{Pr} \Delta Q - \frac{1}{Pr} \varphi_x, \\ C(T) &= \frac{d}{dT} (\beta(T)T) / \beta. \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь Ra есть число Рэлея, вычисленное по высоте слоя и коэффициенту температурного

расширения β , а $Pr = 0.7$ – число Прандтля. Горизонтальные границы протяженности равной π считаются свободными от касательных напряжений и изотермическими $\psi = \omega = Q = 0$, а вертикальные – изотермическими $Q = 0$ с “мягкими” граничными условиями для вихря и функции тока $\omega_x = \psi_x = 0$.

Система уравнений (1) решалась с помощью спектрально-разностного численного метода [1]. В расчетах конвекции смеси $2H_2+O_2$ при давлении $P = 1$ атм. получены различные нелинейные режимы: стационарный, периодический, квазипериодический и стохастический, определены границы их существования и соответствующие числа Нуссельта. При выбранном значении числа Прандтля (0.7) в химически инертном газе наблюдаются только стационарные режимы конвекции [2].

Цель настоящей работы есть более систематичное исследование и уточнение характеристик режимов двумерной конвекции реагирующего газа и проведение расчетов на больших временах для смесей $2H_2+O_2$, $C_2H_2+2.5O_2$ и H_2 +сажа при давлении $P = 0.1$ и 1 атм. На рис. 1-3 результаты показаны для смеси $C_2H_2+2.5O_2$, на рис. 1 давление равно 1 атм.

Установлено, что множитель $S(T)$ перед числом Рэлея может принимать положительные, отрицательные значения и равняться нулю (в работе [2] $S > 0$). Как следствие, при достаточно большом числе Рэлея и $S > 0$ равновесное решение неустойчиво при подогреве снизу, при $S < 0$ – при подогреве сверху, а если горизонтальная линия, где $S = 0$ находится внутри слоя, то неустойчивость развивается как при нагревании, так и охлаждении любой из горизонтальных границ.

На рис. 1 приведены коэффициент температурного расширения β (кривая 1), асимптотика $1/T$ для β при относительно низких и высоких температурах (2) и уменьшенное в 4200 раз значение множителя S как функции температуры (3). Можно видеть, что $S > 0$ соответствует возрастанию коэффициента температурного расширения β , а $S < 0$ – его убыванию.

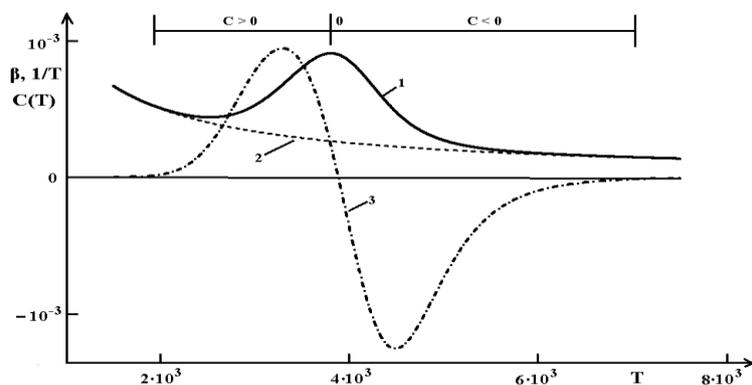


Рис. 1. Коэффициент температурного расширения β , его асимптотика $1/T$ и множитель $S(T)$ как функции температуры.

Установлено, что все нестационарные решения метастабильны, как существующие на ограниченном, хотя и достаточно большом (до 300000 шагов по времени) промежутке времени, после чего происходит выход на стационар. На рис. 2 и 3 показана характерная зависимость числа Нуссельта от времени и его спектр при давлении $P = 0.1$ атм, $Ra_{cr} = 94.07$, $T_0 = 2140^\circ K$, $T_1 = 2340^\circ K$, $Ra = 5000$, $Ra_{cr} = 5000$. Здесь T_0 и T_1 абсолютные температуры нижней и верхней горизонтальных границ. Хотя при $t \approx 3.5$ решение выходит на стационар, его характер эволюции стохастический (турбулентный) со сложным непрерывным спектром.

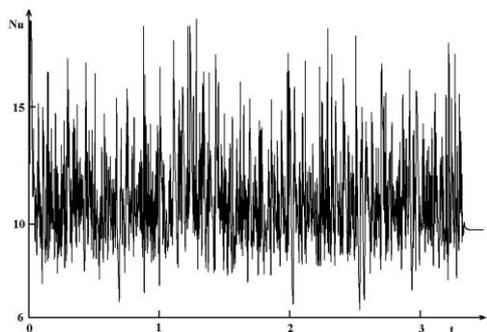


Рис.2. Число Нуссельта от времени.

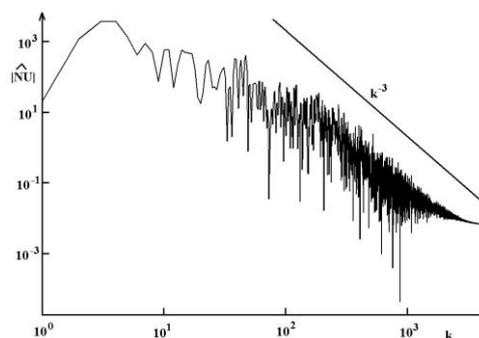


Рис. 3. Спектр числа Нуссельта.

Работа выполнена при поддержке РФФИ грант №15-08-05166.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Палымский И.Б.** Турбулентная конвекция Рэлея-Бенара. Численный метод и результаты расчетов. Германия: LAP, 2011. 232 с.
2. **Palymskiy I.B., Fomin P.A., Hieronymus H.** Rayleigh-Benard convection in a chemical equilibrium gas (simulation of surface detonation wave initiation). Applied Mathematical Modelling, 2008, V.32, N.5, P.660-676.
3. **Геглинг А.В.** Рэлея-Бенара. Структуры и динамика. М.: Эдиториал УРСС, 1999. 247 с.
4. **Николаев Ю.А., Фомин П.А.** О расчете равновесных течений химически реагирующих газов. Физика горения и взрыва, 1982, Т.18, В.1, С.66-72.