

УДК 544.45

ВЛИЯНИЕ ЕСТЕСТВЕННОЙ КОНВЕКЦИИ НА ТЕПЛОЙ ВЗРЫВ В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ

К. Аллали¹, Ю. Жунди¹, А. Таик¹, В. Вольперт²

¹Университет Хассана II, PO Box 146 Касабланка, Марокко, allali@hotmail.com

²Институт им. Камиля Жордана при Университете Лиона 1, 69622 Вийёрбан, Франция

Изучается влияние естественной конвекции на тепловой взрыв в пористой среде. Модель состоит из нелинейного уравнения теплопроводности, уравнений движения несжимаемой жидкости и закона Дарси. Для численного решения конечно-разностных уравнений используются метод переменных направлений с одновременным расщеплением по пространственным координатам и быстрое преобразование Фурье. Полученное решение имеет сложную структуру и содержит как периодические, так и аperiodические осцилляции, в том числе осциллирующий тепловой взрыв. Показано, что конвекция может уменьшить риск возникновения взрыва, обусловленного перемешиванием и потерей тепла. В то же время осцилляция температуры, возникающая вследствие неустойчивости стационарного режима конвекции, может способствовать возникновению взрыва.

Ключевые слова: конвекция, тепловой взрыв, закон Дарси, пористая среда, численное моделирование.

DOI 10.15372/FGV20170202

ВВЕДЕНИЕ

Естественная конвекция реагирующих газов и жидкостей может вызвать тепловой взрыв при их хранении. Тепловой взрыв при наличии естественной конвекции возможен также в различных устройствах при добыче природных ресурсов.

Теория теплового взрыва начинается с классических работ Семенова и Франк-Каменецкого [1, 2]. В модели теплового взрыва Семенова предполагается, что реагирующая среда хорошо перемешана, распределение температуры однородное, условия возникновения теплового взрыва не зависят от геометрии области. В теории теплового взрыва Франк-Каменецкого распределение безразмерной температуры θ описывается реакционно-диффузионным уравнением

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \kappa \Delta \theta + Fk \exp \theta, \quad (1)$$

где t — время, κ — коэффициент термодиффузии, Fk — параметр Франк-Каменецкого, с соответствующими краевыми условиями. Если

существует стационарное решение этого уравнения, то распределение температуры сходится к нему и остается ограниченным. В противном случае решение неограниченно растет, что приводит к тепловому взрыву. Критерий возникновения теплового взрыва зависит от параметра Франк-Каменецкого Fk и геометрии области (см., например, работы [3–6] и библиографию в них).

При наличии естественной конвекции реагирующей среды распределение температуры меняется вследствие дополнительного перемешивания, которое приводит к интенсификации теплопереноса. Следовательно, можно ожидать, что риск возникновения теплового взрыва уменьшится. Однако, как будет показано ниже, воздействие естественной конвекции может быть более сложным и привести в итоге к тепловому взрыву.

Впервые влияние естественной конвекции на возникновение теплового взрыва было исследовано в работах [7, 8], в которых для описания движения жидкости использовались уравнения Навье — Стокса в приближении Буссинеска. Была обнаружена зависимость критериев возникновения теплового взрыва от естественной конвекции. В [9] установлено, что прежде, чем начинается неограниченный рост температуры, происходят ее осцилляции в течение неко-

© Allali K.¹, Joundy Y.¹, Taik A.¹, Volpert V.², 2017.

¹Department of Mathematics, FSTM, MAC Laboratory, University Hassan II-Casablanca, PO Box 146, Mohammedia, Morocco. ²Institute Camille Jordan, University Lyon 1, UMR 5208 CNRS, 69622 Villeurbanne, France.

того промежутка времени. В [10–12] аналогичные исследования выполнены для прямоугольных областей. В [13] исследовалось влияние естественной конвекции на тепловой взрыв в случае течения в горизонтальном цилиндре, в [14] — в сферическом сосуде. В [15] изучалось влияние перемешивания на возникновение теплового взрыва. В [16] выполнено численное моделирование теплового взрыва в квадратной полости пористой среды при наличии конвекции.

В данной работе изучается влияние естественной конвекции на тепловой взрыв в пористой среде. К уравнению (1) добавляется закон Дарси. Рассматривается прямоугольная область. На ее боковых стенках ставятся адиабатические условия для температуры, на нижней и верхней стенках поддерживается постоянная температура. В этом случае уравнение (1) имеет одномерное стационарное решение, зависящее от вертикальной переменной. Стационарное решение существует при любой длине канала. Поэтому в задаче теплопроводности без учета конвекции условие возникновения теплового взрыва не зависит от длины реактора. Однако при наличии конвекции ее интенсивность зависит от длины реактора. Наблюдаются два конкурирующих процесса. С одной стороны, в условиях естественной конвекции увеличиваются потери тепла через границу области вследствие теплопереноса и, следовательно, уменьшается риск возникновения теплового взрыва. С другой стороны, стационарный режим конвекции может стать неустойчивым, в результате чего возникают осцилляции температуры и она может превысить температуру в стационарном режиме, что увеличивает вероятность теплового взрыва.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим реакцию первого порядка



в которой зависимость скорости реакции k от температуры описывается законом Арениуса [17]:

$$k(T) = k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \quad (3)$$

где T — температура, E — энергия активации, R — универсальная газовая постоянная, k_0 — предэкспонент.

В настоящей работе используется модель теплового взрыва в пористой среде, состоящая из реакционно-диффузионного уравнения с конвективным членом для температуры

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T = \kappa \Delta T + qk(T)\varphi(\alpha), \quad (4)$$

уравнения Дарси движения несжимаемой жидкости

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{\mu}{K} \mathbf{v} + \nabla p = g\beta\rho(T - T_0)\boldsymbol{\gamma}, \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (6)$$

Здесь \mathbf{v} — вектор скорости, p — давление, μ — кинематическая вязкость, ρ — плотность, q — выделившееся тепло, g — ускорение свободного падения, β — коэффициент объемного расширения, $\boldsymbol{\gamma}$ — единичный вектор в вертикальном направлении, T_0 — характерная температура, K — проницаемость. Кинетическая функция φ задается уравнением $\varphi(\alpha) = 1 - \alpha$, где α — глубина конверсии. Обычно в теории теплового взрыва расходом реагента пренебрегают [18]. Поэтому глубина конверсии принимается равной нулю, а функция $\varphi(\alpha)$ заменяется единицей. Система уравнений решается в двумерной прямоугольной области $0 \leq x \leq nl$, $0 \leq y \leq l$.

Введем безразмерные переменные

$$x' = \frac{x}{l}, \quad y' = \frac{y}{l}, \quad t' = \frac{\kappa}{l^2} t,$$

$$\mathbf{v}' = \frac{l}{\kappa} \mathbf{v}, \quad p' = \frac{K}{\mu\kappa} p, \quad \theta = \frac{E(T - T_0)}{RT_0^2}$$

и запишем в них следующую систему уравнений:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial \theta}{\partial x} + v \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \text{Fk} \exp \theta, \quad (7)$$

$$\sigma \frac{\partial u}{\partial t} + u + \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \quad \sigma \frac{\partial v}{\partial t} + v + \frac{\partial p}{\partial y} = R_p \theta, \quad (8)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (9)$$

опуская здесь и далее штрихи в обозначении безразмерных величин. Здесь $\text{Fk} = \frac{Eqk_0\alpha \exp(-E/RT_0)l^2}{RT_0^2\kappa}$ — параметр Франк-Ка-

менецкого; $R_p = \frac{K\rho\text{Ra}}{l^2}$, где $\text{Ra} = \frac{g\beta RT_0^2 l^3}{E\kappa\mu}$ —

число Рэлея; u, v — компоненты вектора скорости; $\sigma = 1/V_a$, $V_a = \text{Pr}/\text{Da}$, $\text{Pr} = \mu/\kappa$ — число Прандтля, $\text{Da} = K/l^2$ — число Дарси. В предположении, что скорость энергии активации велика ($RT_0/E \ll 1$), можно выполнить преобразование Франк-Каменецкого. Поэтому в (7) для скорости реакции принято выражение $\text{Fk} \exp \theta$ [2, 6].

Для системы уравнений (7)–(9) на границе области ставятся следующие условия. Нормальная составляющая скорости задается равной нулю на всей границе. На верхней и нижней сторонах прямоугольной области температура задается равной нулю, на боковых сторонах прямоугольника для нее задаются адиабатические условия:

$$x = 0, n: \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = u = 0, \quad (10)$$

$$y = 0, 1: \quad \theta = v = 0. \quad (11)$$

2. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

2.1. Численный метод

Введем функцию тока ψ и вихрь скорости ω [19, 20]:

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi}{\partial y} \\ -\frac{\partial \psi}{\partial x} \end{pmatrix}, \quad \omega = \text{curl } \mathbf{v}. \quad (12)$$

В результате уравнения (7)–(9) преобразуются к следующему виду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial y} = \\ = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \text{Fk} \exp \theta, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\sigma \frac{\partial \omega}{\partial t} + \omega = R_p \frac{\partial \theta}{\partial x}, \quad (14)$$

$$\omega = -\Delta \psi. \quad (15)$$

Граничные условия

$$x = 0, n: \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = \psi = 0, \quad (16)$$

$$y = 0, 1: \quad \theta = \psi = 0. \quad (17)$$

Уравнение (13) заменяется системой конечно-разностных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\theta_{i,j}^{n+1/2} - \theta_{i,j}^n}{\delta t/2} + \\ + \frac{\psi_{i,j+1}^n - \psi_{i,j-1}^n}{2\delta_y} \frac{\theta_{i+1,j}^{n+1/2} - \theta_{i-1,j}^{n+1/2}}{2\delta_x} - \\ - \frac{\psi_{i+1,j}^n - \psi_{i-1,j}^n}{2\delta_x} \frac{\theta_{i,j+1}^n - \theta_{i,j-1}^n}{2\delta_y} = \\ = \frac{\theta_{i+1,j}^{n+1/2} - 2\theta_{i,j}^{n+1/2} + \theta_{i-1,j}^{n+1/2}}{\delta_x^2} + \\ + \frac{\theta_{i,j+1}^n - 2\theta_{i,j}^n + \theta_{i,j-1}^n}{\delta_y^2} + \text{Fk} \exp \theta_{i,j}^n, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\theta_{i,j}^{n+1} - \theta_{i,j}^{n+1/2}}{\delta t/2} + \\ + \frac{\psi_{i,j+1}^n - \psi_{i,j-1}^n}{2\delta_y} \frac{\theta_{i+1,j}^{n+1/2} - \theta_{i-1,j}^{n+1/2}}{2\delta_x} - \\ - \frac{\psi_{i+1,j}^n - \psi_{i-1,j}^n}{2\delta_x} \frac{\theta_{i,j+1}^n - \theta_{i,j-1}^n}{2\delta_y} = \\ = \frac{\theta_{i+1,j}^{n+1/2} - 2\theta_{i,j}^{n+1/2} + \theta_{i-1,j}^{n+1/2}}{\delta_x^2} + \\ + \frac{\theta_{i,j+1}^{n+1} - 2\theta_{i,j}^{n+1} + \theta_{i,j-1}^{n+1}}{\delta_y^2} + \text{Fk} \exp \theta_{i,j}^n, \end{aligned}$$

которая решается методом переменных направлений. Для решения уравнения (14) используется явный конечно-разностный метод, для уравнения (15) — быстрое преобразование Фурье с учетом краевых условий Дирихле. Начальные температура и скорость жидкости полагаются равными нулю. Сходимость схемы контролировалась проведением расчетов на сетках с уменьшающимися шагами по пространственной переменной и по времени. Шаг по безразмерной пространственной переменной выбран равным 2^{-7} (основание 2 необходимо при использовании быстрого преобразования Фурье), шаг по безразмерному времени — $1.56 \cdot 10^{-4}$.

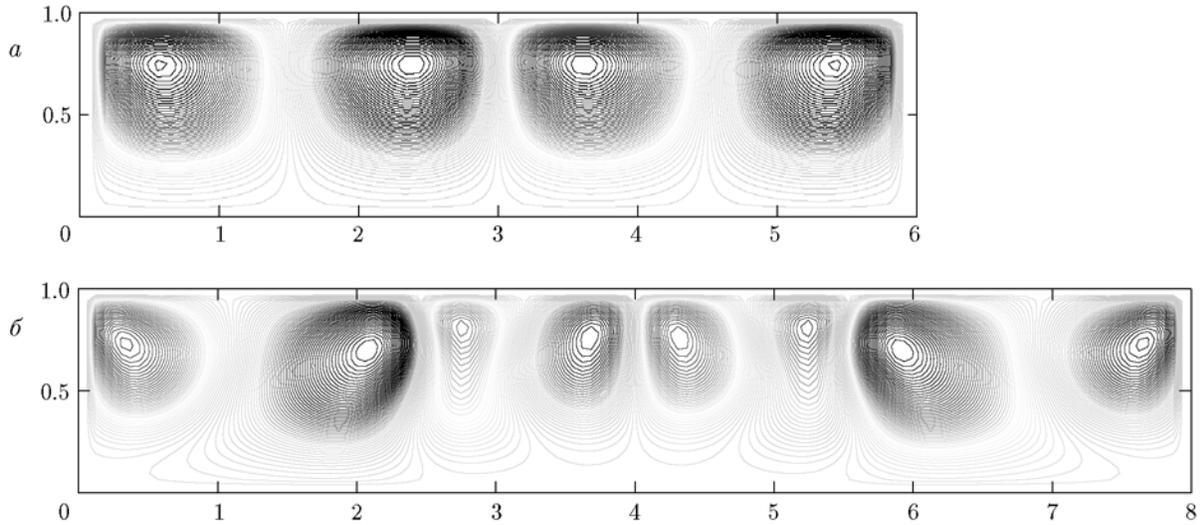


Рис. 1. Линии функции тока при $R_p = 1000$, $Fk = 3.9$, $\sigma = 0.01$ и $n = 6$ (а) и 8 (б)

2.2. Результаты численных расчетов

Стационарный и осциллирующий режимы конвекции. Рассмотрим результаты численного решения задачи (7)–(11). Изучается зависимость теплового взрыва от длины цилиндра n . На рис. 1 приведены результаты численных расчетов при $R_p = 1000$, $Fk = 3.9$, $\sigma = 0.01$. При $n = 6$ имеет место стационарный режим с четырьмя вихрями (рис. 1,а), при $n = 8$ — периодические осцилляции и восемь вихрей (рис. 1,б). Осцилляции во времени наблюдаются при большом количестве вихрей, когда они сжаты и конкурируют за место в пространстве. Количество вихрей зависит от размера области и параметров R_p , Fk . Влияние параметров R_p и Fk на стационарный режим в случае квадратной области исследовалось в [16].

При решении стационарной задачи обнаружено от одного до шести вихрей. В общем случае количество вихрей увеличивается с ростом числа Рэлея или числа Франк-Каменецкого. Отметим, что стационарное решение может быть не единственным при одних и тех же значениях параметров [10]. Множество решений можно получить методом продолжения по параметру, в котором результаты решения используются в качестве начального значения для следующего решения при других значениях параметров. В данной работе не изучается множество решений и используются только нулевые начальные условия для всех вариантов решения.

Устойчивость стационарного решения зависит от числа Франк-Каменецкого. С увеличением Fk стационарное решение (см. рис. 1,а) при $n = 6$ теряет устойчивость и появляются периодические осцилляции. На рис. 2,а показана

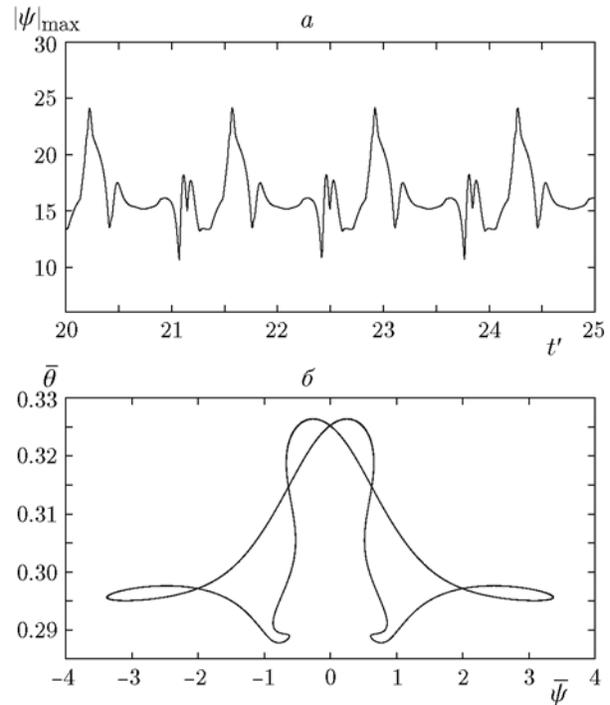


Рис. 2. Зависимость максимального значения функции тока от времени (а) и зависимость средней температуры от среднего значения функции тока (б) при $R_p = 1000$, $Fk = 4.2$, $\sigma = 0.01$ и $n = 6$

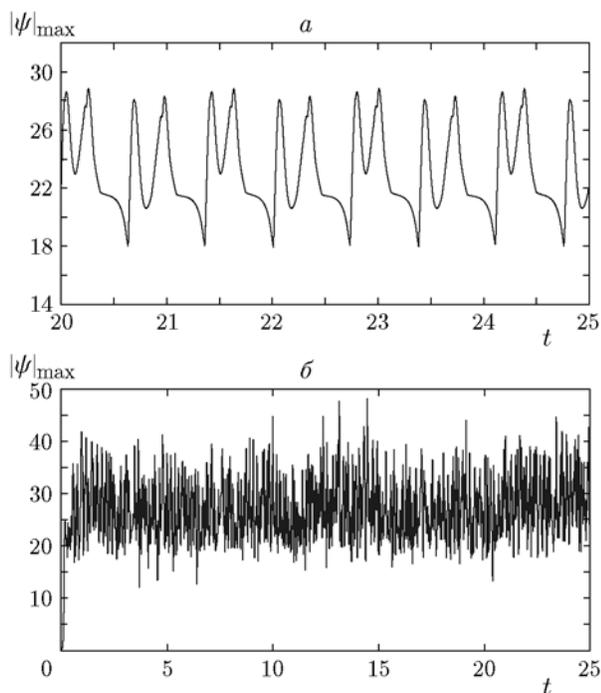


Рис. 3. Зависимость максимального значения функции тока от времени при $R_p = 1000$, $\sigma = 0.01$, $n = 8$ для $Fk = 4.2$ (а) и 4.7 (б)

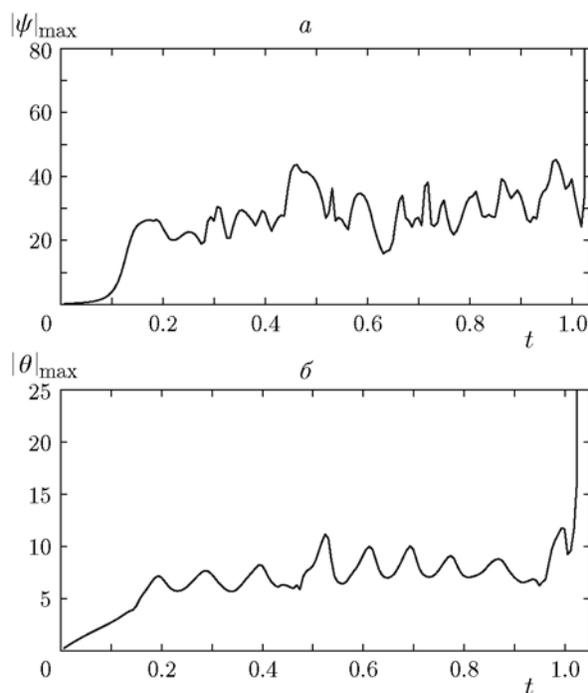


Рис. 4. Хаотический тепловой взрыв. Зависимости максимального значения функции тока (а) и максимального значения температуры (б) от времени при $R_p = 1000$, $Fk = 4.78$, $\sigma = 0.01$ и $n = 8$

ны осцилляции максимального значения функции тока при $Fk = 4.2$, о периодическом характере этого решения также свидетельствует замкнутая траектория в плоскости средних значений функции тока и температуры (рис. 2, б). Дальнейшее увеличение параметра Франк-Каменецкого приводит к аperiodическим осцилляциям, а затем и к тепловому взрыву. При $n = 8$ имеют место периодические колебания при $Fk = 4.2$ (рис. 3, а) и аperiodические при $Fk = 4.7$ (рис. 3, б). При $Fk = 4.78$ происходит тепловой взрыв (рис. 4). Амплитуда осцилляций увеличивается с ростом Fk и тем самым способствует наступлению теплового взрыва.

Условия возникновения теплового взрыва. С увеличением параметра Франк-Каменецкого возрастает выделение тепла в ходе химической реакции. Если высвобождающееся тепло превышает его потери через границы области, то происходит тепловой взрыв. В математическом решении это проявляется в неограниченном росте температуры (см. рис. 4) после нескольких осцилляций, а также в увеличении интенсивности движения жидкости.

Режим осциллирующего теплового взрыва ранее был обнаружен при решении уравнений

Навье — Стокса [9, 10, 11] и уравнений Дарси [16]. Рассмотрим, как ширина прямоугольной области влияет на условия возникновения теплового взрыва. Заметим, что в отсутствие конвекции эти условия не зависят от ширины области. Действительно, полагая в системе (7)–(9) $u = v = 0$, получаем уравнение (1). При адиабатических условиях на боковых стенках это уравнение имеет одномерное стационарное решение в прямоугольной области $\theta_s(y)$, которое зависит только от вертикальной переменной. Для фиксированной высоты области существование стационарного решения зависит только от числа Fk . Его критическое значение равно единице ($Fk_{cr} = 1$) [16].

На рис. 5, а представлена зависимость критического значения параметра Fk от ширины области n . Если Fk превышает критическое значение, ограниченное решение (стационарное или осциллирующее) не существует и температура растет неограниченно. Следует отметить, что зависимость $Fk(n)$ является немонотонной — возрастающей при малых значениях n и убывающей при больших значениях n . Это можно объяснить следующим образом. При ма-

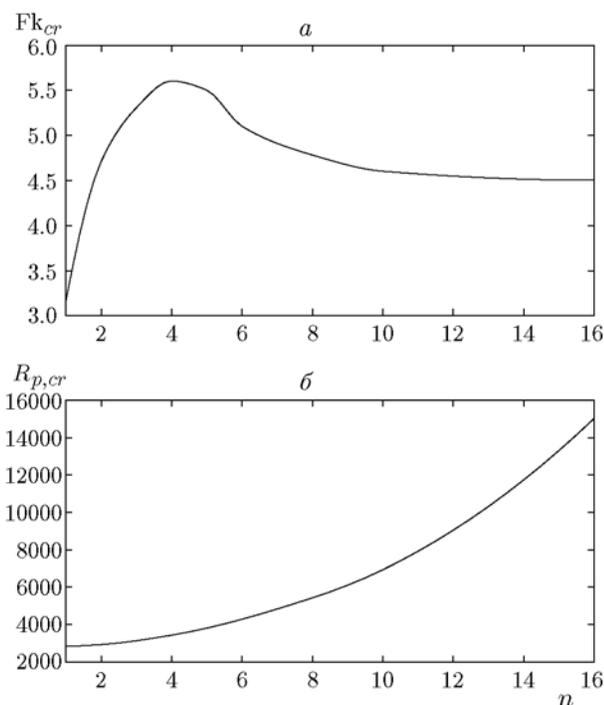


Рис. 5. Зависимости критического значения параметра Франк-Каменецкого при $R_p = 1000$ (а) и критического значения числа Рэлея при $Fk = 3.5$ и $\sigma = 0.01$ (б) от ширины области

ных значениях n режим стационарной конвекции устойчив и интенсивность конвекции возрастает с увеличением ширины области. Поэтому конвективный перенос тепла увеличивается, равно как и потери тепла через границу области. Вследствие этого происходит тепловой взрыв при $Fk > Fk_{cr}$. При $n = 4$ стационарный режим конвекции становится неустойчивым и появляются осцилляции температуры. Локально максимальное значение температуры может превзойти стационарное, и это инициирует взрывной характер реакции. Амплитуда осцилляций увеличивается с ростом n , и, следовательно, критическое значение параметра Fk уменьшается.

Таким образом, конвекция может как препятствовать возникновению теплового взрыва вследствие интенсификации теплопереноса, так и содействовать его возникновению вследствие осцилляции температуры. Этот вывод подтверждается зависимостью критического числа Рэлея $R_{p,cr}$ от ширины области n (рис. 5,б): $R_{p,cr}$ растет с увеличением n . При фиксированном значении R_p и росте n осцилляции увеличиваются, инициируя тепловой

взрыв. Поэтому для предотвращения теплового взрыва необходимо увеличивать число Рэлея.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследованы условия возникновения теплового взрыва, вызванного экзотермической химической реакцией в газе или жидкости в пористой среде. Модель состоит из реакционно-диффузионного уравнения и уравнения Дарси. Задача формулируется для функции тока и решается численно с использованием метода переменных направлений и алгоритма Томаса. Обнаружено существование стационарного и осциллирующих режимов конвекции. Существование и устойчивость стационарных решений зависят от размеров области и двух параметров задачи — числа Франк-Каменецкого и числа Рэлея. Условия возникновения теплового взрыва в задаче теплопроводности, решаемой для прямоугольной области с адиабатическими условиями на границе, при отсутствии конвекции не зависят от ширины области. Установлено, что конвекция может как препятствовать возникновению теплового взрыва вследствие интенсификации теплопереноса, так и содействовать его возникновению вследствие осцилляции температуры. С увеличением ширины области при других фиксированных параметрах задачи стационарный режим конвекции теряет устойчивость и возникают периодические или аperiodические осцилляции. Вследствие осцилляции температура локально может стать выше критической, и это приведет к взрывному течению реакции.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Semenov N. N.** Chemical Kinetics and Chain Reactions. — Oxford: Clarendon Press, 1935.
2. **Frank-Kamenetskii D. A.** Diffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics. — New York: Plenum Press, 1969.
3. **Krause G.** Volume-dependent self-ignition temperatures for explosive materials // Propell., Explos., Pyrotech. — 2012. — V. 37, N 1. — P. 107–115.
4. **Li-shuang H., Shuang-qi H., Xiong C., Jian-bing S.** Initiation capacity of a special shape booster pellet // Explos. Shock Waves. — 2013. — N 2. — 017.
5. **Lovetskii E. E., Maslennikov A. M., Fetisov V. S.** Mechanical effect and dissipative processes accompanying an explosion in a porous medium // J. Appl. Mech. Tech. Phys. — 1981. — V. 22, N 2. — P. 248–266.

6. **Zeldovich Y. B., Barenblatt G. I., Librovich V. B., Makhviladze G. M.** The Mathematical Theory of Combustion and Explosions. — New York: Consultants Bureau, Plenum, 1985.
7. **Merzhanov A. S., Shtessel E. A.** Free convection and thermal explosion in reactive systems // Astronaut. Acta. — 1973. — V. 18. — P. 191–193.
8. **Штессель Э. А., Прибыткова К. В., Мержанов А. Г.** Численное решение задачи о тепловом взрыве с учетом свободной конвекции // Физика горения и взрыва. — 1971. — Т. 7, № 2. — С. 167–178.
9. **Dumont T., Genieys S., Massot M., Volpert V.** Interaction of thermal explosion and natural convection: critical conditions and new oscillating regimes // SIAM J. Appl. Math. — 2002. — V. 63. — P. 351–372.
10. **Belk M., Volpert V.** Modeling of heat explosion with convection // Chaos. — 2004. — V. 14. — P. 263–273.
11. **Ducrot A., Volpert V.** Modelling of convective heat explosion // J. Tech. Phys. — 2005. — V. 46. — P. 129–143.
12. **Lazarovici A., Volpert V., Merkin J. H.** Steady states, oscillations and heat explosion in a combustion problem with convection // Eur. J. Mech. B/Fluids. — 2005. — V. 24. — P. 189–203.
13. **Osipov A. I., Uvarov A. V., Roschina N. A.** Influence of natural convection on the parameters of thermal explosion in the horizontal cylinder // Intern. J. Heat Mass Transfer. — 2007. — V. 50. — P. 5226–5231.
14. **Liu T.-Y., Campbell A. N., Hayhurst A. N., Cardoso S. S.** On the occurrence of thermal explosion in a reacting gas: The effects of natural convection and consumption of reactant // Combust. Flame. — 2010. — V. 157. — P. 230–239.
15. **Kagan L., Berestycki H., Joulin G., Sivashinsky G.** The effect of stirring on the limit of thermal explosion // Combust. Theory and Modell. — 1997. — V. 1. — P. 97–111.
16. **Allali K., Bikany F., Taik A., Volpert V.** Numerical simulations of heat explosion with convection in porous media // Combust. Sci. Technol. — 2015. — V. 187, N 3. — P. 384–395.
17. **Menzinger M., Wolfgang R.** The meaning and use of the Arrhenius activation energy // Angewandte Chemie Intern. Ed. in English. — 1969. — V. 8, N 6. — P. 438–444.
18. **Thomas P. H.** Effect of reactant consumption on the induction period and critical condition for a thermal explosion // Proc. of the Roy. Soc. London. A: Math., Phys. Eng. Sci. — 1961. — V. 262, N 1309. — P. 192–206.
19. **Jha B., Cueto-Felgueroso L., Juanes R.** Quantifying mixing in viscously unstable porous media flows // Phys. Rev. E. — 2011. — V. 84, N 6. — 066312.
20. **Vafai K., Huang P. C.** Analysis of heat transfer regulation and modification employing intermittently emplaced porous cavities // J. Heat Transfer. — 1994. — 116.3. — P. 604–613.

*Поступила в редакцию 8/X 2015 г.,
в окончательном варианте — 15/XII 2015 г.*
