УДК 378.046: 621.4: 662

# Математическое моделирование процесса коксоотложения биотоплив в трубопроводах авиационных двигателей

Л.С. Яновский, В.В. Павлов, Ю.Н. Слесарев, В.И. Чернецов

#### Аннотация:

В статье представлена математическая модель процесса образования коксоотложений при течении биотоплива в обогреваемых каналах теплообменника авиационного двигателя в виде системы уравнений теплопереноса и диффузии для растворенного кислорода, промежуточных продуктов, ВМС и для частиц отложений в приближении пограничного слоя. Приведены результаты расчета характеристик процесса коксоотложения в зависимости от внешних условий процесса течения топлива.

#### Ключевые слова:

биотопливо, коксоотложение, математическая модель процесса.

Рассмотрим окисление углеводородного топлива при течении в обогреваемых каналах по схеме:

топливо + кислород  $\xrightarrow{K_1}$  топливо + радикал, радикал + топливо  $\xrightarrow{K_2}$  топливо + ВМС, ВМС  $\xrightarrow{K_w}$  К О К С.

Модель образования отложений может быть представлена системой уравнений теплопереноса и диффузии для растворенного кислорода, промежуточных продуктов, ВМС и для частиц отложений в приближении пограничного слоя.

Поскольку концентрации продуктов окисления весьма малы (10 моль/л), течение окисляющегося топлива можно отнести к классу течений химически реагирующих сильно

разбавленных жидкостей. Задача расщепляется на диффузионную и независящую от нее тепловую.

Система уравнений гидродинамики и теплообмена записывалась в виде:

$$\rho W_{x} \frac{\partial u}{\partial x} + \rho W_{r} \frac{\partial u}{\partial r} = -\frac{dp}{dx} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\tau)$$
(1)

$$\frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{\rho} \mathbf{w}_{x}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\mathbf{r} \mathbf{\rho} \mathbf{w}_{r}) = 0$$
<sup>(2)</sup>

$$\boldsymbol{\rho} \mathbf{w}_{x} \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial x} + \boldsymbol{\rho} \mathbf{w}_{r} \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rq) + \mathbf{w}_{x} \frac{dp}{dx} + \tau \frac{\partial \mathbf{w}_{x}}{\partial r}$$
(3)

с граничными условиями x = 0;  $w_x = w_x^0(r)$ ;  $h = h_o; P = P_o;$ 

$$x>0;\,r=0;\;\;\frac{\partial w_{_{X}}}{\partial r}=\frac{\partial h}{\partial x}=0;\;r=r_{_{O;}}\;w_{x}=0;\;\;w_{r}=0;\;q_{c}=\lambda\frac{\partial T}{\partial \kappa}\;\;.$$

Для вычисления градиента давления используется условие постоянства расхода  $\overline{\rho}w_x = const,$ 

Расчет турбулентной вязкости проводился путем решения уравнений баланса масс. Турбулентное число Прандтля Pr<sub>t</sub> принимается равным 1.

Система уравнений баланса масс имеет вид:

$$\rho \mathbf{w}_{\mathrm{x}} \frac{\partial \mathbf{C}_{\mathrm{i}}}{\partial \mathrm{x}} + \rho \mathbf{w}_{\mathrm{r}} \frac{\partial \mathbf{C}_{\mathrm{i}}}{\partial \mathrm{r}} = \mathbf{I}_{\mathrm{i}} + \frac{1}{\mathrm{r}} \frac{\partial}{\partial \mathrm{r}} \left[ \rho r \left( \mathbf{D}_{\mathrm{M}} + \mathbf{D}_{\mathrm{T}} \right) \frac{\partial \mathbf{C}_{\mathrm{i}}}{\partial \mathrm{r}} \right]$$
(4)

$$\rho W_{x} \frac{\partial C_{BMC}}{\partial x} + \rho W_{r} \frac{\partial C_{BMC}}{\partial r} = I_{BMC} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ \rho r \left( D_{M} + D_{T} \right) \frac{\partial C_{BMC}}{\partial r} \right]$$
(5)

где: I<sub>i</sub>; I<sub>вмс</sub> - соответственно источниковый член для кислорода (i=1), промежуточного продукта (i = 2) и ВМС;

D<sub>м</sub>, D<sub>т</sub>, - соответственно коэффициенты молекулярной и турбулентной диффузии;

С - весовая концентрация компонента.

Граничные условия: x = 0;  $C = C_1^\circ$ ;  $C_2 = C_{BMC} = 0$ ;

$$\begin{split} x > 0; \ r &= 0; \ \frac{\partial C_{i}}{\partial r} = \frac{\partial C_{BMC}}{\partial r} = 0; \\ r &= r_{o;} \ \frac{\partial C_{i}}{\partial r} = 0; \ J_{w,BMC} = D \frac{\partial C_{BMC}}{\partial r}; \end{split}$$

Запишем выражения для источниковых членов

$$I_{1} = \frac{\rho^{2}}{\mu_{cM}} K_{1}C_{1}C_{cH} ; I_{2} = \rho \left( K_{1} \frac{\rho}{M_{O_{2}}} C_{1}C_{cH} - K_{2} \frac{\rho}{\mu_{cM}} C_{2}C_{cH} \right); I_{BMC} = \frac{\rho^{2}}{\mu_{cM}} K_{2}C_{2}C_{cH} ;$$

где: µ - молекулярная масса, кг/кмоль;

 $K_i = A_i \exp(-E_i / RT)$  - константы скорости окисления углеводорода.

Система уравнений (1 - 5) решалась конечно-разностным методом с помощью двухслойной шеститочной неявной итерационной схемы. Уравнения движения, энергии и диффузии записываются в безразмерном виде:

$$A\frac{\partial u}{\partial x} + \widetilde{B}\frac{\partial u}{\partial R} = C + \frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial R}\left(D\frac{\partial u}{\partial R}\right).$$

Таблица 1

U	А	В	С	D
C <sub>1</sub>	$\frac{\mathbf{\rho}}{\mathbf{\rho}_{o}}W_{x}$	$2Pe_{o}\frac{\rho_{w_{r}}}{\rho_{w}}$	$-\frac{\rho dPe_{o}}{\rho_{\overline{w}}}\left(\frac{K_{1}\rho}{\mu_{cH}}C_{1}\cdot C_{cH}\right)$	$4\frac{\Pr_{o}}{\operatorname{Sc}}\frac{\mu}{\mu_{o}}\left(1+\frac{\operatorname{Sc}}{\operatorname{Sc}_{t}}\frac{\varepsilon\tau}{v}\right)R$
C <sub>2</sub>	$\frac{\rho}{\rho_o}W_x$	$2 Pe_o \frac{\rho_{w_r}}{\rho_w}$	$\frac{\rho dPe_{o}}{\rho_{\overline{w}}}(\frac{K_{1}\rho}{\mu_{cH}}C_{1}C_{cH} -$	$4\frac{\mathrm{Pr}_{\mathrm{o}}}{\mathrm{Sc}}\frac{\mu}{\mu_{\mathrm{o}}}\left(1+\frac{\mathrm{Sc}}{\mathrm{Sc}_{\mathrm{t}}}\frac{\varepsilon\tau}{\nu}\right)\mathrm{R}$
C <sub>BMC</sub>	$\frac{\rho}{\rho_{o}}W_{x}$	$2 Pe_o \frac{\rho_{w_r}}{\rho_w}$	$-K_{2} \frac{\rho}{\mu_{o_{2}}} C_{c_{H}} C_{2})$ $\frac{\rho dPe_{o}}{\rho_{\bar{w}}} (K_{2} C_{c_{H}} C_{2} \frac{\rho}{\mu_{c_{H}}})$	$4\frac{\mathrm{Pr}_{\mathrm{o}}}{\mathrm{Sc}}\cdot\frac{\mu}{\mu_{\mathrm{o}}}\left(1+\frac{\mathrm{Sc}}{\mathrm{Sc}_{\mathrm{t}}}\frac{\varepsilon\tau}{\nu}\right)\mathrm{R}$

Поскольку образование отложений определяется совокупным влиянием гидродинамических и тепловых условий, а также химией процесса, то даже качественно процесс коксообразования будет зависеть от конкретного значения режимных параметров. Моделировались условия (без учета образующихся в объеме частиц), близкие к условиям работы топливных коллекторов основных камер сгорания ГТД.

На рисунках 1 - 4 приведены зависимости среднемассовых концентраций кислорода, промежуточного продукта, ВМС и скорости образования отложений по длине канала при различных значениях тепловой нагрузки, массового расхода и начальной температуры топлива АБТ.



Рисунок 1 – Распределение среднемассовых концентраций продуктов жидкофазного окисления топлива по длине канала:





окисления топлива по длине канала:





$$1 - [O2]$$
;  $2 - [PR]$ ;  $3 - [SR]$   
(qw = 3,8·105 Bt/m2;  $G = 0,582 \cdot 10-2$  kg/c; Tbx = 373 K).



Рисунок 4 – Распределение среднемассовых концентраций продуктов жидкофазного окисления топлива АБТ по длине канала:

$$1 - [O_2] \ ; \ 2 - [PR] \ ; \ 3 - [SR]$$
  
$$(q_w = 3.8 \cdot 10^5 \text{ Bt/m}^2 \ ; \ G = 0.833 \cdot 10^{-2} \text{ kg/c} \ ; \ T_{\text{bx}} = 463 \text{ K})$$

В диапазоне температур топлива (50-150°С), поступающего в обогреваемые участки коллекторов, скорость жидкофазного окисления мала и увеличивается только по мере нагрева топлива. По мере прогрева топлива происходит развитие реакций в объеме - концентрация кислорода падает, концентрация промежуточного продукта первоначально растет, с израсходованием кислорода ее рост замедляется, а по мере образования ВМС концентрация промежуточного продукта будет падать. Образующиеся ВМС диффундируют к стенке и скорость их расходования (соответственно скорость образования отложений) определяется соотношением между скоростями реакции на стенке и диффузии.

Существенное развитие процесса окисления по длине канала при незавершенности процесса окисления в целом свидетельствует о сильном влиянии в расчетных условиях объемной кинетики на образование и распределение массы отложений по длине канала. При таких режимах течения лимитирующими, по сравнению с продольным конвективным переносом, являются объемные реакции, наиболее медленной из которых является реакция образования ВМС. При этом уменьшение времени пребывания топлива в канале приводит к уменьшению суммарной массы образующихся отложений.

Сильное влияние на скорость протекания реакций в объеме оказывает существенная неизотермичность потока по сечению канала, возникающая при характерных тепловых нагрузках  $Q = 10^6 \text{ Br/m}^2$  и при числах Re =10000 ÷ 20000 (рисунок 4). Изменение температуры по сечению канала приводит к сильному ускорению реакций в пристенной области и ускоренному протеканию процесса окисления в целом. Таким образом, при равных среднемассовых температурах скорость окисления (и "эффективная" температура реакции) тем выше, чем больше перегрев стенки.

Кроме того, сильная неравномерность скоростей реакций по сечению канала при конечной скорости диффузионных процессов приводит к изменению локального соотношения

5

концентрации компонент по сравнению со статическими условиями и смене типа лимитирующих реакций. Профили концентраций принимают характерный М-образный вид (рисуноки 5 - 9). На рисунках 5 - 7 показано развитие профилей концентраций кислорода, промежуточного продукта и ВМС по длине канала для переходного и турбулентного режимов течения. Видно, как по мере развития процесса окисления происходит смещение максимума концентраций промежуточных компонентов от стенки к оси.



Рисунок 5 – Профили концентраций промежуточных продуктов окисления для различных сечений канала x/d



Рисунок 6 – Профили концентраций высокомолекулярных соединений для различных сечений канала x/d 1 – 12; 2–112: 3 – 160; 4 – 204; 5 – 240



Рисунок 7 – Профили концентраций кислорода для различных сечений канала:



Рисунок 8 – Профили концентраций промежуточных продуктов окисления для различных сечений канала x/d :

1 - 10; 2 - 31; 3 - 51; 4 - 111; 5 - 196; 6 - 246



Рисунок 9 – Профили концентраций высокомолекулярных соединений для различных сечений канала:

1 - 51; 2 - 373 3 - 111; 4 - 151; 5 - 196; 6 - 220; 7 - 246

В случае ламинарного потока область реакций сосредоточивается в сравнительно узкой зоне, так что можно говорить о "фронте" реакции. На рисунках 8 и 9 приведены результаты

расчета такого течения. "Выгорание" кислорода в пристенной зоне и оттеснение "фронта" реакций от стенки к оси может приводить, как это видно из рисунка 10, к тому, что массовый поток на стенку достигает максимума тогда, когда среднемассовая концентрация ВМС от своего максимума еще далека. При таком течении локальное возмущение или турбулизация потока ниже по течению может приводить к резкому увеличению массового потока ВМС на стенку и к интенсификации коксообразования.

Наряду с соотношением времен объемных реакций и конвекции, удобно рассматривать соотношение времен диффузии ВМС и поверхностных реакций.

Все приведенные выше результаты относятся к значению величины К<sub>w</sub>, когда лимитирующей стадией образования углеродистых отложений на стенке являлась диффузия ВМС к стенке.



Рисунок 10 – Распределение среднемассовых концентраций продуктов жидкофазного окисления и массового потока вещества отложений на стенку канала по длине канала: 1 – [O<sub>2</sub>]; 2 – [PR]; 3 – [SR]; 4 – J ( $\emptyset$  4 x 1000; ламинарный режим: q<sub>w</sub> = 5·10<sup>5</sup> BT/m<sup>2</sup>; G = =0,126 · 10<sup>-2</sup> кг/c; T<sub>вх</sub> = 293 K)

Константа скорости гетерогенной реакции К<sub>w</sub> зависит от материала поверхности и качества ее обработки. Константы скорости гетерогенной реакции определялись по результатам экспериментов для медной и стальной стенок с различной степенью обработки поверхности, а также со специальными покрытиями. Оказалось, что для всех случаев поверхностей, за исключением стальных, полированных и ряда покрытий, в рассмотренном диапазоне режимных параметров реализуется диффузионный характер торможения процесса коксообразования.

### Библиографический список

1. Галимов Ф.М., Гарифуллин Ф.А. Ингибирование коксоотложений в условиях реализации химического хладоресурса углеводородных топлив / Межвуз. Сб. трудов

«Тепломассообменные процессов и аппараты химической технологии». –Казань, 2001. –С.41-47.

2. Панченков Г.М., Баранов В.Я. Кинетика термического крекинга и н-гексадекана в потоке. // Изв.ВУЗов. Нефть и газ. 1958. №1. –С.103-115.

3. Магарил Р.С. Механизм и кинетика гомогенных термических превращений углеводородов. –М.:Химия, 1970. -224с.

4. Бухаркин А.К., Ковалев Г.И. Применение фактора «жесткости» для определения температур начала разложения реактивных топлив. // Химия и технология топлив и масел. - 1979.- №8. -С.20-22.

5. Шигабиев Т.Н., Яновский Л.С., Галимов Ф.М. и др. Физический и химический хладоресурс углеводородных топлив. -Казань: Мастер Лайн, 2000., -240с.

6. Дубовкин Н.Ф., Яновский Л.С., Шигабиев Т.Н. и др. Инженерные методы определения физико-химических и эксплуатационных свойств топлив. –Казань, Казанский научный центр РАН, 2000. -378с.

## Сведения об авторах

Яновский Леонид Самойлович, начальник отдела химмотологии ФГУП "ЦИАМ им. П.И. Баранова", д.т.н., профессор, e-mail:yanovskiy@ciam.ru

Павлов Виктор Владимирович, профессор Российского государственного университета инновационных технологий и предпринимательства, д.т.н., e-mail:info@itbu.ru

Слесарев Юрий Николаевич, профессор Российского государственного университета инновационных технологий и предпринимательства, д.т.н., e-mail:<u>info@itbu.ru</u>

Чернецов Владимир Иванович, профессор Российского государственного университета инновационных технологий и предпринимательства, д.т.н., e-mail:info@itbu.ru