

Создание высокопроизводительных программных средств для предсказательного моделирования процесса коксообразования в тракте охлаждения жидкостных ракетных двигателей

А.В. Киюц¹, А.М. Кривцов^{1,2}, В.А. Кузькин^{1,2}, А.А. Устинова¹

¹Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

²Институт проблем машиноведения Российской академии наук

Высокие параметры рабочего процесса жидкостных реактивных двигателей (ЖРД) служат причиной чрезвычайно интенсивного теплообмена между продуктами сгорания и стенками камеры двигателя. Локальные значения удельного теплового потока в отдельных сечениях камеры достигают нескольких тысяч ккал/(м²сек). Это может привести к нагреву и разрушению стенок камеры за считанные секунды. Для предотвращения перегрева используется наружное проточное охлаждение, обеспечивающее непрерывный отвод тепла от наружной поверхности огневой стенки в жидкость, циркулирующую в тракте охлаждения [1]. В кислородно-керосиновых ЖРД в качестве охлаждающей жидкости применяют керосин. Керосин при нормальных температурах и давлениях — стабильная смесь углеводородов, но при больших температурах, наблюдаемых в каналах охлаждения ЖРД, керосин способен к термическому разложению (пиролизу) с образованием отложений — кокса. Отложения снижают теплопроводность, что может привести к недопустимому увеличению температуры огневой стенки.

Пиролиз компонент керосина — сложный процесс, инициируемый высокой температурой и ускоряющийся контактом с твердой поверхностью (стенкой). Потеря каждого атома водорода приводит, как правило, к изменению пространственной структуры углеводорода. Простейшая модель пиролиза может быть описана формулой [2]

$$\dot{V}/V = \nu e^{-E/RT}, \quad (1)$$

где V — объем топлива, ν — коэффициент пропорциональности (размерности частоты), R — универсальная газовая постоянная, E — энергия активации, T — температура топлива. В частности, для *n*-декана $\nu = 2.1 \cdot 10^{15}$ (1/с), $E/R = 31\,700$ (Дж/моль). Авиационный керосин представляет собой смесь более сотни различных углеводородов, преимущественно C_8 – C_{13} . Для численных расчетов используют суррогатные модели, содержащие меньше 5 компонент и обладающие при этом физическими свойствами, близкими к авиационному керосину. В качестве такой модели может выступать смесь: 79% *n*-decane, 13% 1,1,2-trimethylcyclohexane, 8% *n*-hexylbenzene [3-4]. Процесс коксования также в значительной степени зависит от свойств поверхности [5].

Установившийся режим теплопередачи от продуктов сгорания (ПС) через стенку к охлаждающей жидкости может быть описан системой уравнений:

$$q = \alpha(\theta_1 - T_1) = k(T_1 - T_2) = \beta(T_2 - \theta_2),$$

где q - удельный тепловой поток, α - локальный коэффициент теплоотдачи от продуктов сгорания к стенке, T_1 и T_2 - температура внутренней и наружной поверхности огневой

стенки, θ_1 - температура продуктов сгорания, θ_2 - температура охлаждающей жидкости, k - локальный коэффициент теплоотдачи через стенку, β - локальный коэффициент теплоотдачи от стенки к охлаждающей жидкости (может быть определен по формуле М.А. Михеева [6]). Данные формулы позволяют провести оценочный расчет теплообмена с учетом отложений на стенках тракта охлаждения. Полученная таким образом зависимость температуры внутренней поверхности огневой стенки от толщины отложений (кокса) имеет вид

$$T_1(h_K) = \frac{\alpha\theta_1\left(\frac{h_M}{\lambda_M} + \frac{h_K}{\lambda_K} + \frac{1}{\beta}\right) + \theta_2}{1 + \alpha\left(\frac{h_M}{\lambda_M} + \frac{h_K}{\lambda_K} + \frac{1}{\beta}\right)},$$

где λ_K и h_K - коэффициент теплопроводности и толщина отложений (кокса), λ_M и h_M - коэффициент теплопроводности и толщина стенки тракта охлаждения. Данная формула позволяет построить графики нагрева стенки в зависимости от толщины отложений на стенках тракта охлаждения - Рис. 1. Так как температуры свыше 1000 К могут приводить к прогоранию стенки, из графиков следует, что отложения толщиной в несколько сотен микрон являются чрезвычайно опасными для работы двигателя.

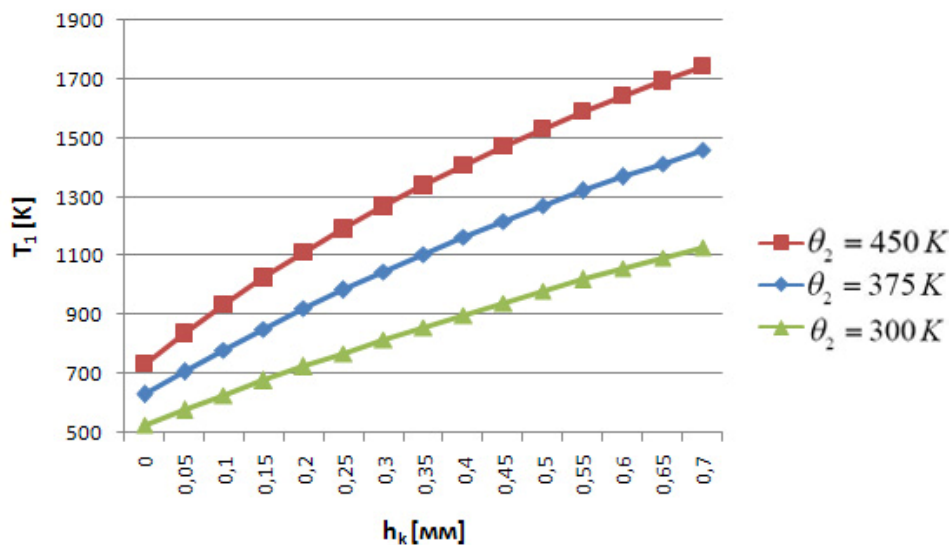


Рис. 1. Нагрев внутренней поверхности огневой стенки в зависимости от толщины отложений на стенках тракта охлаждения при различных температурах охлаждающей жидкости.

Для более точного моделирования процесса коксообразования необходима разработка корректной модели углеводородов и создание высокопроизводительных программных средств, позволяющих моделировать сильное деформирование и разрушение (диссоциацию) углеводородов. Для этих целей используется модель углерода, описанная в [7], основанная на использовании моментных взаимодействий и пакет программ молекулярно-динамического моделирования, учитывающий вращательные степени свободы электронных оболочек атомов. Для ускорения расчетов осуществляется неявный учет динамики водородных атомов. На Рис.2 приводится пример молекулярно-

динамических расчетов для простейшего углеводорода — бензола C_6H_6 . Исследовались зависимости степени диссоциации бензола от времени при постоянной температуре - Рис. 2б. Полученные графики имеют экспоненциальный характер и хорошо согласуются с расчетами по формуле (1).

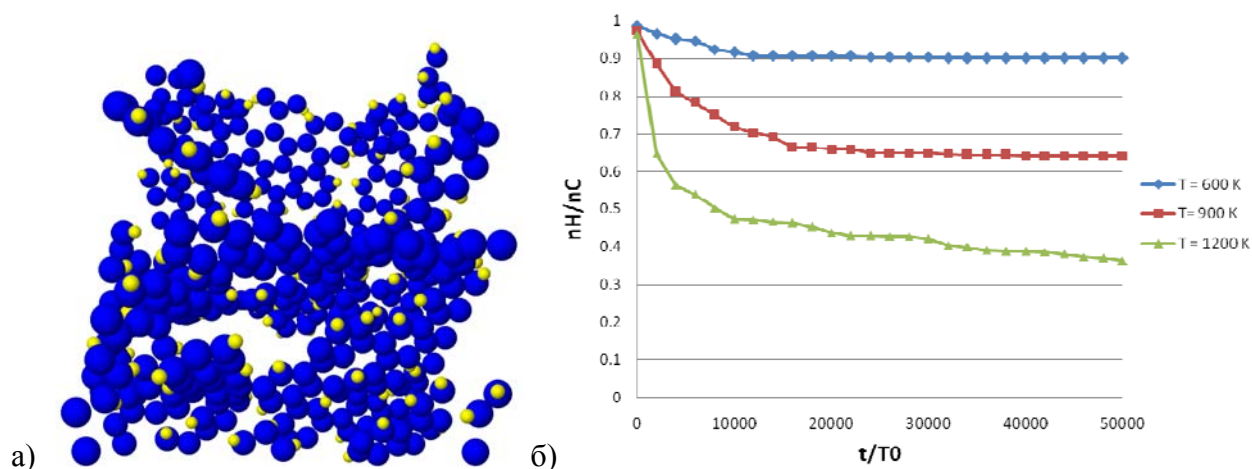


Рис. 2: а) образование углеродных кластеров из бензола при $T = 1100\text{ K}$ (синий — углерод, желтый — водород), б) зависимость доли диссоциировавшего водорода от времени при различных температурах, T_0 — временной масштаб, равный удвоенному периоду продольных колебаний в двухатомной системе С-С.

Таким образом, предсказательное моделирование процесса коксообразования в тракте охлаждения жидкостных ракетных двигателей требует разработки высокопроизводительных программных средств для согласованного моделирования на нескольких масштабных уровнях — от атомарного до макроскопического, что успешно может быть решено на многопроцессорных вычислительных системах экзафлопного класса.

Авторы благодарны Н. Н. Смирнову за предложенную задачу и полезные обсуждения.

Литература:

- [1] Edwards T. Cracking and deposition behavior of supercritical hydrocarbon aviation fuels. *Combust. Sci. and Tech.*, 178: 307–334, 2006.
- [2] Ward T.A. Physical and Chemical Behavior of Flowing Endothermic Jet Fuels. Doctoral Dissertation, University of Dayton, Ohio, 2003.
- [3] Jiang J., Zhang R., Wang F. Thermal-Structural Analysis of Regenerative Cooled Scramjet. *Modern Applied Science*. Vol. 4, No. 6; June 2010. P. 30-36.
- [4] Zhang R.-L., Jiang J., Le J.-L. The simulation of endothermic fuel flow in cooling channels of Scramjet. *International Conference on Methods of Aerophysical Research, ICMAR 2008*. 7 p.
- [5] Holmen A., Lindvag O.A. Coke formation on nickel-chromium-iron alloys. *Journal of materials science*, 22, (1987), 4518, 4522.
- [6] Михеев М.А. Основы теплопередачи. Госэнергоиздат, 1956, 392 с.
- [7] Кузькин В.А., Кривцов А.М. Описание механических свойств графена с использованием частиц с вращательными степенями свободы. *ДАН*, 2011, том 440, № 4, с. 476–479.