

выполненные в днище. Использование нескольких ступеней разделения позволяет увеличить общую эффективность осаждения более легкой фракции эмульсии.

При проектировании предлагаемых сепараторов для разделения эмульсий важной задачей является выбор наиболее рациональных конструктивных и режимных параметров работы, обеспечивающих высокую эффективность разделения. В связи с этим были проведены численные исследования в программном комплексе ANSYS Fluent. Рассматривалось многофазное течение эмульсии вода – нефтепродукты (мазут). Для расчета использовалась многофазная эйлерова-эйлерова модель Volume of Fluid (VoF). Значение объемных долей воды и нефтепродуктов составляли 0,7 и 0,3 соответственно. В расчете использовалась стандартная  $k - \varepsilon$  модель турбулентности.

Исследования проводились при ширине П-образных сепараторов  $b=20$  мм, длина борта составляла  $h=10$  мм, зазор между двумя рядами сепараторов – 5 мм, а диаметр отверстий для выхода легкой фазы эмульсии – 2,25 мм. В ходе исследований изменялись высота устройства  $H$  от 10 до 30 мм и средняя скорость эмульсии на входе от 1 до 2 м/с.

Результаты исследований показали, что увеличение средней скорости потока и высоты устройства приводит, как правило, к повышению эффективности разделения эмульсии. Так,

### Список литературы

1. Sun W., Cheng Q., Zheng A., Zhang T., Liu Y. // *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2018.– Vol.122.– P.719–731.

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА И ЦЕТАНОПОВЫШАЮЩЕЙ ПРИСАДКИ

М.В. Майлин, А.А. Бердникова

Научный руководитель – к.т.н., научный сотрудник Е.В. Францина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, [maylin\\_max@mail.ru](mailto:maylin_max@mail.ru)

Активное освоение северных и арктических территорий Российской Федерации предъявляет все более жесткие требования к качеству топлив. Для дизельного топлива основными экс-

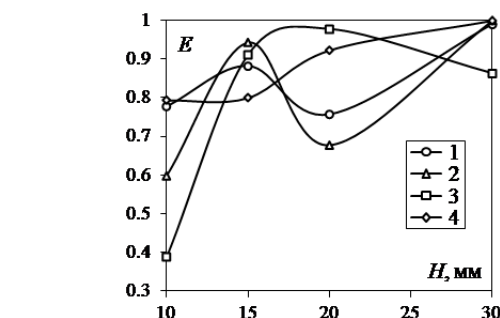


Рис. 2. Зависимость эффективности разделения эмульсии от высоты устройства при различной средней скорости движения эмульсии  $W_p$ , м/с: 1 – 1; 2 – 1,5; 3 – 1,8; 4 – 2

например, при увеличении высоты устройства с 10 до 30 мм наблюдается повышение эффективности разделения эмульсии в среднем на 50,55% (рис. 2). Стоит отметить, что при средней скорости движения потока равной 2 м/с и высоте устройства равной 20 и 30 мм эффективность разделения эмульсии составляет 0,923 и 0,999 соответственно.

Проведенные исследования показывают, что для повышения производительности и эффективности разделения эмульсий в предлагаемых аппаратах с прямоугольными сепараторами при проектировании следует выбирать наибольшую высоту устройства (до 50 мм) и среднюю скорость движения эмульсии в пределах 2–2,5 м/с.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ № МК-4522.2018.8.

плуатационными характеристиками являются цетановое число, низкотемпературные свойства, теплотворная способность. В большинстве случаев акцент делается на низкотемпературные

**Таблица 1.** Энергии взаимодействия углеводород-присадка

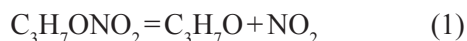
Группа углеводородов	E, кДж/моль • К	Энергия Гиббса, кДж/моль
н-парафины	56,89635644	-810,370815
Нафтен замещенные (заместитель н-алкил)	-0,234625846	-20,71998099
Нафталин замещенные (заместитель изо-алкил)	-0,330536	-40,4000256

свойства, что отрицательно сказывается на цетановых характеристиках и, как следствие, на ресурсе двигателя. В связи с чем актуальным становится прогнозирование цетанового числа дизельных композиций в зависимости от углеводородного и группового составов [1].

Целью работы стало исследование влияния межмолекулярных взаимодействий углеводородов между собой и входящей состав дизельных топлив цетаноповышающей присадки на скорость реакции самовоспламенения, т.е. на цетановое число. Все расчеты проводились с помощью программного комплекса квантово-химических расчетов Gaussian с учетом термобарических условий работы дизельного двигателя – 2273 К и 5,0 МПа.

Реакции самовоспламенения углеводородов протекают по радикально-цепному механизму, при этом лимитирующей стадией реакции является образование активного радикала. Механизм действия цетаноповышающей присадки рассматривался следующий:

1) Распад изопропилнитрата



2) Взаимодействие  $C_3H_7O$  радикала с молекулой углеводорода с образованием и-пропилового спирта и УВ-радикала



При этом стадия (2) является лимитирующей.

Согласно общим правилам энергетике химической реакции, для любой химической реакции существует некий энергетический барьер, который может быть определен значением энергии активации. Значение энергии активации может быть представлено следующим уравнением:

$$E_{акт} = f(\tau)$$

где  $\tau$  – время воспламенения углеводорода

### Список литературы

1. Пучков Н.Г. Дизельные топлива. Государственное научно-техническое издательство

Но величина энергии активации может быть как увеличена, так и уменьшена за счет энергии межмолекулярного взаимодействия между углеводородом и присадкой. В данной работе с помощью программного комплекса квантово-химических расчетов Gaussian были рассчитаны энергетические и термодинамические характеристики индивидуальных молекул, радикалов всех углеводородов каждой группы, а также энергетические и термодинамические характеристики для межмолекулярного взаимодействия углеводорода и присадки.

Результаты расчета энергий взаимодействия углеводород-присадка для 3 групп представлены в таблице 1.

Как видно из таблицы 1 максимальным значением положительной энергией взаимодействием обладают углеводороды группы н-парафинов, что свидетельствует о том, что скорость образования радикалов н-парафинов наибольшая по сравнению с другими, что и подтверждается экспериментальными значениями цетановых чисел н-парафинов. Отрицательная энергия взаимодействия углеводород-присадка соответствует нафталин замещенным углеводородам с заместителем изо-алкил. Данный факт свидетельствует о том, что для данной группы углеводородов будет наблюдаться минимальное значение скорости реакции образования радикала, а следовательно и низкое значение цетанового числа, что и подтверждается экспериментальными данными

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Проект №18-79-00095) в Национальном исследовательском Томском политехническом университете в рамках Программы повышения конкурентоспособности Национального исследовательского Томского политехнического университета.

нефтяной и горно-топливной литературы.– Москва–Ленинград, 1953.– 194с.