

УДК 629. 194. 34: 536. 468.

В.А. Щукин, Ф.М. Валиев, О.В. Дунай, Ф.В. Щукин*Казанский государственный технический университет им. А.Н. Туполева (КГТУ-КАИ)*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ТОКСИЧНЫХ ВЕЩЕСТВ В ТУРБУЛЕНТНОМ ПЛАМЕНИ ОДНОРОДНОЙ СМЕСИ

Представлена физико-химическая модель образования и выхода нормируемых токсичных веществ (несгоревших углеводородов HC , окиси углерода CO , окислов азота NO_x) и сажи из турбулентного пламени однородной гомогенной смеси.

Предлагаемый подход к анализу процесса образования загрязняющих веществ в горелочных устройствах взаимно увязывает химический механизм реакций и кинетику реакций с учетом особенностей, налагаемых процессом горения и турбулентностью, и согласует с термодинамикой. Позволяет получить полуэмпирические соотношения, качественно и количественно отражающие, с точностью до эмпирических постоянных, закономерности образования HC , CO , NO_x и сажи при турбулентном горении однородных углеводородо-воздушных смесей.

Ключевые слова: горение, химический механизм, модельное кинетическое уравнение, характеристики турбулентности, флуктуационное реагирование, несгоревшие углеводороды.

Простейшим устройством для исследования горения в турбулентном потоке является камера сгорания прямоугольного поперечного сечения с двумя нишевыми стабилизаторами пламени. В такой камере образуется плоский турбулентный факел пламени, схематично показанный на рис. 1, с тремя характерными областями протекания реакций: область свежей смеси (зона I), зона горения (зона II), область продуктов горения (зона III).

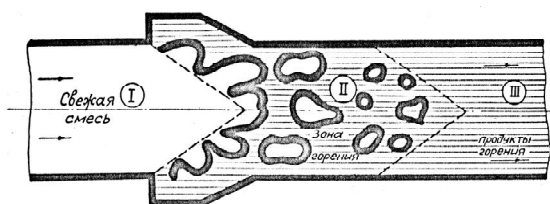


Рис. 1. Схема структуры турбулентного факела пламени однородной смеси

При моделировании образования загрязняющих веществ использовались следующие известные модельные представления и схематизация.

Для аналитического описания работы камеры сгорания и характерных областей реагирования при горении использовалась теория реакторов [1, 2].

Работа камеры сгорания представлялась каскадом трех последовательно включенных гомогенных реакторов с газофазными реакциями, непрерывного действия, идеального вытеснения, работающих в адиабатических условиях (рис. 1).

Первый реактор составляет область свежей смеси (зона I), второй реактор – зону горения (зона II), третий реактор – область продуктов горения (зона III). Такая схематизация обусловлена следующим:

- в горелку непрерывно подается подготовленная смесь, которая сгорает во фронте пламени, а продукты горения уносятся из горелки;
- процессы горения протекают в газовой фазе и рассматривается случай горения предварительно подготовленной газовой смеси;
- в действительности реакторы являются смешанными, в которых нет ни полного вытеснения, ни полного смешивания, но в зависимости от режима течения реакционной среды и кинетики, идущих реакций, характеристики реактора могут быть ближе к характеристикам того или другого предельных типов. Наиболее сопоставимые с опытом результаты ожидаются по модели реактора идеального вытеснения [1].

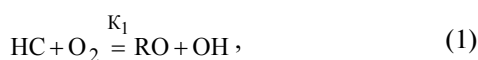
- камеры сгорания газотурбинных двигателей работают при большой теплопроизводительности и относительные потери тепла в окружающую среду составляют доли процента, т. е. условия работы ближе к адиабатическим.

Детальный химический механизм окисления авиационных углеводородных топлив кислородом воздуха с учетом реакций образования всех загрязняющих веществ пока не установлен. Известно, что механизм окисления углеводородов в воздухе при горении не совпадает со стехиометрическим уравнением, а протекает по сложному

цепному механизму с участием всех пяти типов частиц, которые вообще способны принять участие в химических превращениях, а именно: молекул, атомов, ионов, свободных радикалов и комплексов. Имеющиеся данные [3,4] позволяют выделить лимитирующие элементарные стадии для каждого токсичного вещества в отдельности.

1. Несгоревшие углеводороды (НС)

Для анализа и обобщения экспериментальных результатов образования и выхода несгоревших углеводородов из всех характерных областей реагирования принимался упрощенный химический механизм односторонней бимолекулярной реакции, символически записываемой в виде:



где НС — условная формула углеводородного соединения,

O_2 — молекулярный кислород,

RO — окись углеводородного радикала,

ОН — гидроксил,

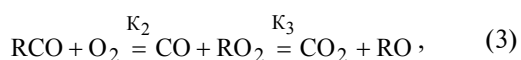
K_1 — константа скорости реакции.

Скорость расходования углеводородных соединений оценивается по закону действующих масс зависимостью:

$$w_{\text{НС}} = K_1 \cdot C_{\text{НС}} \cdot C_{\text{O}_2} \quad (2)$$

2. Окись углерода (СО)

В общем механизме полного окисления углеводородов окись углерода является промежуточным продуктом. В то же время в переобогащенных топливом смесях СО выступает одним из основных продуктов реакции. Это означает, что в богатых смесях превалирующую роль играют процессы образования СО, а в бедных смесях одинаково важными становятся как процессы образования СО, так и процессы окисления СО до двуокиси углерода. Принимается, что выход СО при горении углеводородного топлива определяется протеканием двух последовательных бимолекулярных реакций образования СО и его расходования в результате окисления до CO_2 . Характерные особенности закономерностей выхода СО могут быть получены на основе известного положения химической кинетики о квазимономолекулярности бимолекулярных реакций при большом избытке одного из компонентов. В итоге можно представить следующую схему механизма образования и расходования СО:



где каждая из реакций представляет собой

простую бимолекулярную реакцию. Тогда скорости образования и расходования окиси углерода могут быть представлены соответственно выражениями:

$$(w_{\text{CO}})_{\text{обр.}} = K_2 \cdot C_{\text{RCO}} \cdot C_{\text{O}_2}, \quad (4)$$

$$(w_{\text{CO}})_{\text{расх.}} = K_3 \cdot C_{\text{CO}} \cdot C_{\text{RO}_2} \quad (5)$$

где RCO — кислородосодержащий углеводородный радикал,

RO_2 — свободный радикал,

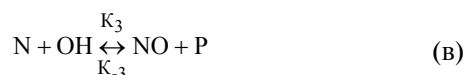
RO — остальные продукты окисления,

K_2 — константа скорости квазимономолекулярной реакции образования промежуточного продукта СО,

K_3 — константа скорости квазимономолекулярной реакции расходования промежуточного продукта СО.

3. Окислы азота (NO_x)

В продуктах горения углеводородных топлив в воздухе в основном содержится окись и двуокись азота, причем преобладает окись азота (NO). При сжигании современных авиационных топлив, очищенных от азота, окись азота образуется в результате окисления атмосферного молекулярного азота. Химический механизм образования окиси азота в смесях кислорода с азотом хорошо разработан Я.Б. Зельдовичем [5] и представляется следующими расширенными элементарными реакциями:



Первые две реакции (а,б) представляют собой реакции цепного неразветвленного механизма. Третье уравнение (в) отражает роль цианистых соединений в образовании NO. Это равносильно предположению, что образование NO с участием углеводородных соединений лимитируется элементарной бимолекулярной реакцией атомарного азота в вещество Р, концентрация которого пропорциональна концентрации цианистых соединений.

Используя принцип квазистационарных концентраций, в работе [6] приводится следующее

приближенное выражение для скорости образования NO по этому механизму:

$$w_{NO} = 2 \cdot k_1 \cdot C_O \cdot C_{N_2} \cdot \left\{ \frac{1 - \frac{C_{NO}^2}{K_{p,NO} \cdot C_{O_2} \cdot C_{N_2}}}{1 + \frac{k_{-1} \cdot C_{NO}}{(k_2 \cdot C_{O_2} + k_3 \cdot C_{OH})}} \right\}, \quad (6)$$

где $K_{p,NO} = (k_1/k_{-1}) \cdot (k_2/k_{-2})$ – константа равновесия реакции $N_2 + O_2 \leftrightarrow 2NO$,

k_1 – константа скорости прямой реакции (а),

k_{-1} – константа скорости обратной реакции (а),

k_2 – константа скорости прямой реакции (б),

k_{-2} – константа скорости обратной реакции (б),

k_3 – константа скорости прямой реакции (в),

Для случая простых бимолекулярных реакций, идущих без изменения числа молей в изотермических условиях, имеются простые аналитические решения уравнений кинетической кривой [2].

Для количественного выражения малых концентраций токсичных веществ удобно использовать относительную массовую долю, представляющую собой отношение массы i -го токсичного вещества в граммах к массе топлива в килограммах, которую принято называть индексом эмиссии (EI_i). Эта величина показывает удельный выход токсичного вещества и ее удобно использовать для оценки выхода токсичных веществ при горении любого топлива в любом горелочном устройстве. Индексы эмиссии соответствующих веществ характеризуют качество сжигания топлива в камерах сгорания с точки зрения выхода вредных веществ. Индексы эмиссии, связанные с объемными долями, например, с частями на миллион, соотношением [7]:

$$EI_i = \frac{\mu_i}{\mu} \cdot (1 + \alpha \cdot L_0) \cdot C_i \cdot 10^{-3}, \frac{г}{кг \cdot \text{топлива}}, \quad (7)$$

где μ – молекулярная масса продуктов реакции;
 μ_i – молекулярная масса i -го токсического вещества;

α – коэффициент избытка воздуха;

L_0 – стехиометрическое соотношение;

C_i – концентрация i -го вещества в ч.н.м.;

10^{-3} – числовой коэффициент увязки размерностей.

Отношение абсолютной концентрации i -го вещества к исходной абсолютной концентрации углеводородов с точностью до отношения молекулярных масс численно равно индексу эмиссии данного вещества, т. е.:

$$\frac{C_i}{C_{HC}} = \frac{\mu_i}{\mu_{HC}} \cdot EI_i \cdot 10^{-3}, \quad (8)$$

Основные параметры химического процесса (концентрации веществ, температура, давление) изменяются во времени, причем для последовательно включенных реакторов продолжительность реакций в каждом реакторе играет особую роль, поскольку основные параметры на выходе из предстоящего реактора являются начальными параметрами на входе в последующий реактор, т. е. на границе раздела они должны численно совпадать. Для реакторов непрерывного действия продолжительность реакции не может быть измерена непосредственно, так как в реакционном пространстве изменяется не только состав, но и температура, давление, число молей, линейная скорость реагентов и траектория движения, например, за счет диффузии. В этом случае вместо продолжительности реакции пользуются величиной времени пребывания, определяемой как отношение объема каждого реактора к объемному расходу реагентов:

$$\tau = \frac{V_p}{Q_{cm}}, \quad (9)$$

Хотя истинное время реакций может отличаться от времени пребывания, но для реакторов идеального вытеснения эта разница незначительна.

Химические превращения в каждом реакторе в отдельности проходят в изотермических условиях, с соответствующими средними значениями параметров. Это допущение позволяет использовать известные аналитические решения уравнений кинетических кривых изотермических реакций, для которых в литературе имеются установленные кинетические параметры – предэкспоненциальные множители, константы скоростей, энергии активаций.

Так в области свежей смеси (первый реактор) температура практически постоянна вплоть до границы с зоной горения (вторым реактором), т. е. до фронта воспламенения и равна значению T_0 , задаваемому исходными условиями. Время пребывания в этой области $\tau_{св.см}$ определяется размерами горелки и скоростью смеси, а константа скорости реакций – уравнением Аррениуса:

$$k_{равн..} = k_0 \cdot \exp(-E_a / RT_0), \quad (10)$$

где k_0 – предэкспоненциальный множитель, R – универсальная газовая постоянная, T_0 – начальная температура смеси, E_a – энергия активации.

Влияние турбулентности на процесс химического реагирования в этой области можно не учитывать, поскольку установлено, что если скорость химической реакции мала по сравнению

со скоростью затухания пульсаций термодинамических параметров (температуры, давления, концентраций веществ), то влияние турбулентности на среднее значение скорости реакции пренебрежимо мало. Тогда среднее значение скорости химической реакции полностью определяется средними значениями термодинамических параметров и константы скорости реакции [8]. Скорости реакций в этой области малы из-за низкой начальной температуры.

В области продуктов горения (третий реактор) реакции идут при начальном давлении. Температура не повышается, поскольку основное тепловыделение происходит в зоне горения (второй реактор), и равна термодинамически равновесной температуре горения. T_r при времени, равном времени пребывания в продуктах горения за факелом пламени $t_{пр.г}$, а константа скорости реакций определяется по уравнению Аррениуса:

$$k_{равн.} = k_0 \cdot \exp(E_a/RT_r), \quad (11)$$

Скорости реакций в этой области малы из-за низкой концентрации реагирующих веществ и влиянием турбулентности здесь можно также пренебречь.

Для полной характеристики равновесной системы достаточно знание температуры, давления и состава. Так, например, значения равновесной температуры горения и равновесного состава продуктов горения можно рассчитать по стандартной методике [9].

Условия в пламени (второй реактор) не только не изотермические, но и существенно неравновесные как на макроскопическом уровне, так и на уровне флуктуаций термодинамических параметров. В этих условиях использование простых уравнений кинетических кривых изотермических реакций возможно, если принимать средние значения констант скоростей реакций для пламени $k_{пл}$, которые отличаются от соответствующих равновесных значений, но могут быть выражены через равновесные значения, оценить неравновесную температуру $T_{нерав.}$ в пламени и определить время горения τ_r . Оценить значения этих параметров ($k_{пл}$, $T_{нерав.}$, τ_r) можно на основе явления флуктуационного реагирования при горении [10] следующим образом.

Неравновесную систему в первом приближении можно представить двумя условными температурами T_p и T_ϕ . Величина T_p представляет собой температуру при условии, если бы система находилась в равновесном состоянии. Величина T_ϕ представляет собой температуру (флуктуационную) при условии, если равновесные флуктуации энергии, соответствующие T_ϕ , равны по величине неравновесным флуктуациям. Максимальное значение температуры T_ϕ оценивается в

предположении, что отклонение от равновесия энергетического состояния в реагирующей системе пропорционально общему запасу тепловой энергии, выделившейся в процессе горения, т. е. при изменении температуры от начальной T_0 до температуры продуктов горения T_r :

$$T_\phi = T_{неравн.} \approx A_2 \cdot T_r \cdot \left[1 + \frac{A_1 \cdot R \cdot (T_r - T_0)}{E_a} \right], \quad (12)$$

где A_1 , A_2 — эмпирические постоянные.

Тогда неравновесные значения констант скорости в пламени $k_{пл}$ можно выразить через их равновесные значения:

$$k_{пл} = k_{неравн.} = k_{равн.} \cdot e^{\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_p} - \frac{1}{T_\phi} \right)}, \quad (13)$$

где T_p — термодинамическая равновесная температура, T_ϕ — неравновесная (флуктуационная) температура.

Время горения в теории нормального распространения пламени определяется как среднее время реакций в зоне горения τ_x , равное времени, за которое при максимальной скорости тепловыделения все тепло химических реакций идет на повышение температуры от T_0 до T_r . Это время связано с величиной нормальной скорости распространения пламени U_n соотношением:

$$\tau_x = a/U_n^2, \quad (14)$$

где a — коэффициент температуропроводности продуктов горения.

В свете представлений о флуктуационном механизме реагирования в пламени время горения равно времени флуктуационного реагирования. Количественно это время можно оценить как время, за которое выделится тепло, необходимое для повышения температуры от начала реакций горения T_b до его завершения T_k . Для бимолекулярной реакции окисления углеводородного топлива время горения может быть представлено соотношением:

$$\tau_r = \frac{\rho_0 \cdot c_p \cdot (T_k - T_b)}{q \cdot k_{пл} \cdot C_{HC} \cdot C_{O_2}}, \quad (15)$$

где ρ_0 — плотность смеси, q — тепловой эффект реакции, c_p — теплоемкость, C_{HC} и C_{O_2} — текущие концентрации веществ.

Аналитическое выражение для определения T_b приведено в работе [11]. Значение T_k при отсутствии внешних воздействий на пламя близка к адиабатной температуре горения T_r , поэтому в этих условиях возможна замена $(T_k - T_b)$ на $(T_r - T_b)$.

Химические реакции при горении (второй реактор) – быстро текущие реакции. Установлено, что турбулентность влияет на процесс горения в основном посредством изменения структуры зоны горения вследствие высоких значений коэффициентов турбулентного переноса, чем посредством турбулентных пульсаций термодинамических параметров. Влияние турбулентности на закономерности образования токсичных веществ в турбулентном пламени однородной смеси можно оценить на основе «поверхностной» модели турбулентного горения [12].

Согласно этой модели структура турбулентного факела пламени представляется состоящим из объема, занимаемого искривленным под действием турбулентности локальным фронтом пламени (копией ламинарного). По одну сторону которого находится свежая смесь с исходными параметрами, а по другую сторону продукты горения. Отношение объема, занимаемого локальным фронтом пламени $V_{л.ф.}$, ко всему объему турбулентного факела пламени $V_{т.ф.}$ представляет собой критерий механизма горения в турбулентном потоке K_M [13]:

$$K_M = \frac{V_{л.ф.}}{V_{т.ф.}}, \quad (16)$$

Полагая, что химические реакции в турбулентном факеле пламени идут только в объеме, занимаемом локальным фронтом пламени, осредненная константа скорости реакций турбулентного факела пламени может быть представлена соотношением:

$$K_{пл.т.} = K_{пл.} \cdot K_M, \quad (17)$$

С другой стороны критерий механизма K_M может быть представлен как отношение времени горения в ламинарном фронте τ_Γ к общему времени горения в турбулентном пламени $\tau_{т.г.}$, т. е.:

$$K_M = \frac{\tau_\Gamma}{\tau_{т.г.}}, \quad (18)$$

откуда общее время горения в турбулентном пламени через время горения в ламинарном пламени выразится отношением:

$$\tau_{т.г.} = \frac{\tau_\Gamma}{K_M}, \quad (19)$$

Количественно K_M и $\tau_{т.г.}$ можно оценить по полуэмпирическим соотношениям [13]:

$$K_M = B_K \cdot \frac{a_0 / U_H^2}{\frac{l_0}{w'} \cdot \ln \left(1 + \frac{w'}{U_H} \right)}, \quad (20)$$

где B_K – эмпирическая постоянная; a_0 – коэффициент молекулярной температуропроводности; U_H – нормальная скорость распространения пламени исходной смеси; l_0 – эйлеров масштаб турбулентности; w' – пульсационная скорость.

$$\tau_{т.г.} = B \cdot \frac{l_0}{w'} \cdot \ln \left(1 + \frac{w'}{U_H} \right), \quad (21)$$

где B – эмпирическая постоянная.

Поскольку основные изменения концентраций различных веществ происходят в зоне горения (второй реактор), то текущие времена пребывания в каждом реакторе и удобней оценивать относительно турбулентного времени горения $\tau_{т.г.}$, т. е. введя относительное время турбулентного горения:

$$\bar{\tau}_{т.г.} = \frac{\tau}{\tau_{т.г.}} = K_M \cdot \tau_\Gamma, \quad (22)$$

Переход на относительное время позволяет увязать закономерности образования токсичных веществ с пространственно-временными характеристиками горения, что придает этим закономерностям большую общность.

Для более полного установления закономерностей образования токсичных веществ при турбулентном горении однородной смеси необходима оценка тех эффектов, которые выходят за рамки элементарных соотношений «поверхностной» модели турбулентного горения.

Во-первых, эффект кривизны локальных фронтов пламени, связанный с тепловыми и диффузионными потоками в вогнутых и выпуклых частях искривленного фронта. Этот эффект приводит к температурной и концентрационной неоднородности. Первые порции свежей смеси, сгорающие в начале зоны горения, в частности, в тех местах, где локальный фронт обращен выпуклостью в сторону свежей смеси, происходит охлаждение зоны горения и соответственно понижается температура горения. Это приводит к уменьшению местных констант скоростей реакций. В тех местах, где локальный фронт пламени обращен выпуклостью в сторону продуктов горения и в порциях смеси, сгорающих в конце зоны горения, происходит повышение температуры исходной смеси, соответственно и температуры горения, что приводит к увеличению местных констант скоростей реакций. Темпера-

турная неоднородность приводит к увеличению эквивалентной средней константы скоростей реакций в пламени. Поскольку искривление ламинарных фронтов турбулентностью пропорционально критерию механизма турбулентного горения K_m , то количественно величину температурной неоднородности ΔT можно оценить соотношением:

$$\Delta T \approx K_m \cdot (T_v - T_0), \quad (23)$$

Во-вторых, турбулентность вызывает эффект гашения пламени из-за неустойчивости ламинарного фронта к внешним сильным возмущениям скорости, а также из-за сильного охлаждения самых передних участков локальных фронтов пламени, окруженных сравнительно холодной свежей смесью. Так как это тоже связано с развитием искривлений ламинарного фронта, то влияние эффекта можно предположить пропорциональным критерию механизма турбулентного горения. С физической точки зрения эффект гашения пламени проявляется в уменьшении диапазона температур начала T_v и конца T_k реакций горения, т. е. $(T_k - T_v)$. Для количественной оценки влияния эффекта гашения пламени реакций горения турбулентностью можно принять, что интервал температур горения в турбулентном пламени $(T_k - T_v)_t$ связан с аналогичным интервалом ламинарного пламени соотношением:

$$(T_k - T_v)_t = (1 - K_m)(T_k - T_v) \approx (1 - K_m)(T_g - T_v), \quad (24)$$

В-третьих, турбулентность изменяет саму структуру ламинарного фронта пламени за счет эффектов мелкомасштабного воздействия. С одной стороны турбулентность приводит к искривлению и развитию локальных фронтов, порождая макронеоднородность структуры турбулентного факела пламени. С другой стороны турбулентность, интенсифицируя процессы обмена на мелкомасштабном уровне, приводит к уменьшению пространственных неоднородностей в узком слое ламинарного пламени. Интенсификация процессов обмена внутри узкой зоны реакций приводит к уменьшению неравновесных флуктуаций термодинамических параметров и соответственно уменьшает величину неравновесных констант скоростей реакций горения. Тогда неравновесные флуктуации температуры в турбулентном факеле пламени $T_{ф.т.}$ могут быть связаны с критерием механизма турбулентного горения соотношением:

$$T_{ф.т.} \approx A_2 \cdot T_g \cdot \left[1 + \frac{A_1 \cdot R \cdot (1 - K_m) \cdot (T_g - T_0)}{E_a} \right], \quad (25)$$

где A_1, A_2 — эмпирические постоянные, R — универсальная газовая постоянная, E_a — энергия активации.

Основываясь на «поверхностной» модели турбулентного горения, основные закономерности образования загрязняющих в турбулентном факеле пламени должны полностью соответствовать закономерностям образования их в ламинарном пламени однородной смеси.

Предлагаемый подход при моделировании образования загрязняющих веществ позволяет использовать одни и те же уравнения кинетических кривых для ламинарного и турбулентного пламени

Перечень ссылок

1. Денисов Е. Т. Кинетика гомогенных химических реакций. М.: Высшая школа, 1987. 367 с.
2. Кнорре Д.Г., Эммануэль Н.М. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа, 1974, 400 с.
3. Марголис Л.Я. Окисление углеводородов на итерогенных катализаторах. М.: Химия, 1977, 328 с.
4. Теория горения и взрыва. Сборник статей. М.: Наука, 1981, 411 с.
5. Зельдович Я.Б., Садовников П.Я., Франк-Каменецкий Д.А. Окисление азота при горении. М.: Изд-во АН СССР, 1947, 145 с.
6. Образование и разложение загрязняющих веществ в пламени. Под ред. Ю.Ф. Дитякина. М.: Высшая школа, 1974, 400 с.
7. Канило П.М. Токсичность ГТД и перспективы использования водорода. Киев: Наук. Думка, 1982. 140 с.
8. Вильямс. Ф. Турбулентное течение реагирующих газов. М. Мир, 1983, 325 с.
9. Алемасов В.Е., Дрегаллин А.Ф., Тишин А.П., Худяков В.А. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания / Под ред. акад. В.П. Глушко. М.: ВИНТИ АН СССР, 1973. т.3, 437-483 с.
10. Шукин В.А. Явление флуктуационного реагирования в газах. // Рабочие процессы в камерах сгорания воздушно-реактивных двигателей. Межвузовский сборник, Казань, 1987, с. 4.
11. Шукин В.А., Янковский В.М., Талантов А.В. Нормальная скорость распространения пламени с учетом нарушения равновесного состава газа в зоне горения. Казань: Труды КАИ, 1970, вып. № 124, с. 35-49.
12. Шетинков Е.С. Физика горения газов. М.: Наука, 1965, 739 с.
13. Талантов А.В. Горение в потоке. М.: Машиностроение, 1978, 160 с.

Поступила в редакцию 01.06.2011

В.А. Щукін, Ф.М. Валієв, О.В. Дунай, Ф.В. Щукін. Моделювання формування токсичних речовин в турбулентному полум'ї однорідної суміші

Представлено фізико-хімічну модель формування і виходу нормованих токсичних речовин (Вуглеводородів HC, окислів вуглецю CO, окислів азоту NO_x) і сажі з турбулентного полум'я однорідної гомогенної суміші.

Запропонований підхід до аналізу процесу формування забруднюючих речовин в пальникових пристроях, взаємопов'язує хімічний механізм реакцій і кінетику реакцій з урахуванням особливостей, що накладаються процесом горіння і турбулентністю, і узгоджує з термодинамікою. Дозволяє отримати напівемпіричні співвідношення, якісно і кількісно відображуючи, з точністю до емпіричних констант, закономірності формування HC, CO, NO_x і сажі при турбулентному горінні однорідних вуглеводородно-повітряних сумішей.

Ключові слова: горіння, хімічний механізм, модельне кінетичне рівняння, характеристики турбулентності, флуктуаційне реагування, вуглеводороди, що не згоріли.

V.A. Shchukin, F.M. Valiev, O.V. Dunay, F.V. Shchukin. Simulation of toxic substances in a turbulent flame homogeneous mixture

Represented by physico-chemical model of education and yield standardized toxic substances (unburned hydrocarbons HC, carbon monoxide CO, nitrogen oxides NO_x) and soot from turbulent flame uniform homogeneous mixture. The proposed approach to the analysis of the formation of pollutants into the burners are mutually linked the chemical reaction mechanism and kinetics of the reactions with the specifications imposed by the process of combustion and turbulence, and agrees with thermodynamics. Allows us to obtain semi-empirical relation, both qualitatively and quantitatively reflect, up to empirical constants, regularities of HC, CO, NO_x and soot in turbulent combustion of homogeneous hydrocarbon-air mixtures.

Key words: combustion, chemical mechanism, the model kinetic equation, the characteristics of turbulence, the fluctuation response, unburned hydrocarbons.