

*From atoms and molecules
to new materials and technologies*

**Редуцирование детальных химических механизмов:
Обзор Модуля Редуцирования для Chemical Workbench
и его использование**

23 июля, 2014

Overview of the webinar

1. О компании «Кинтех Лаб»
2. Что такое редуцирование механизмов?
3. **Demo:** Работа с модулем редуцирования Chemical Workbench
4. Рекомендации по редуцированию кинетических механизмов
5. **Demo:** Выбор значений числовых параметров
6. **Demo:** Редуцирование механизмов для диапазона условий
7. **Demo:** Применение группы методов редуцирования

Компания «Кинтех Лаб» основана в 2001 году ведущими учеными из РНЦ «Курчатовский институт» и МГУ им. М.В. Ломоносова

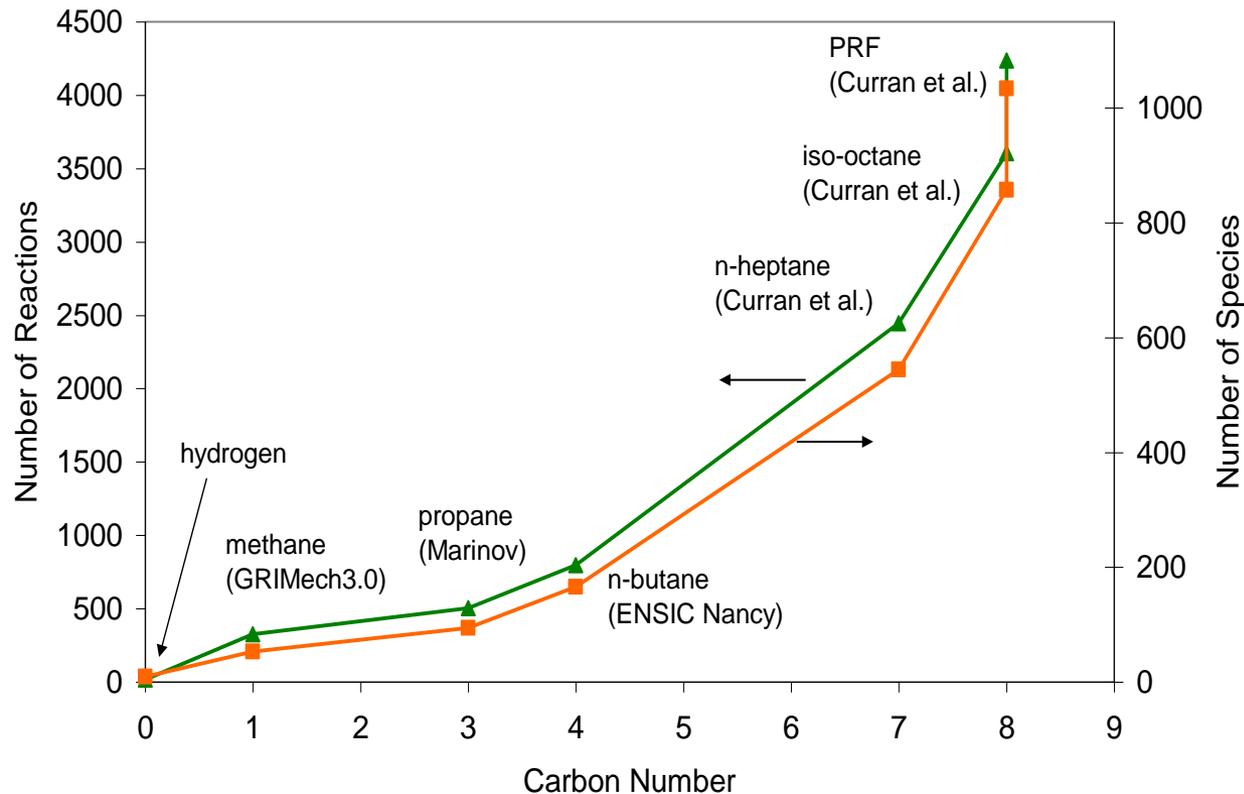
Деятельность компании:

- ✓ Выполнение исследовательских проектов и консультирования для широкого спектра приложений
- ✓ Разработка программного обеспечения для процессов в химически реагирующих средах и полного цикла дизайна устройств/технологий
- ✓ Поддержка исследовательской деятельности заказчиков с использованием собственного программного обеспечения

Кинтех Лаб разрабатывает методы и программное обеспечение для многоуровневого моделирования в для широкого спектра инженерных приложений:

- ✓ **KintechDB** – сетевая база данных свойств веществ, скоростей элементарных реакций и химических механизмов. *Приложения:* информационная поддержка кинетического моделирования на всех уровнях и этапах.
- ✓ **Chemical Workbench** – интегрированная среда для концептуального дизайна физико-химических процессов, разработки и редуцирования химических кинетических механизмов. *Приложения:* построение детальных кинетических механизмов пиролиза, горения, химических процессов в плазме и на поверхности; концептуальный анализ процессов/устройств.
- ✓ **Khimera** – уникальная программа для расчета микроскопических параметров веществ и процессов «из первых принципов». *Приложения:* построение детальных кинетических механизмов горения, плазмохимических процессов, взаимодействия газов и плазмы с поверхностью.

Что такое редуцирование механизмов?

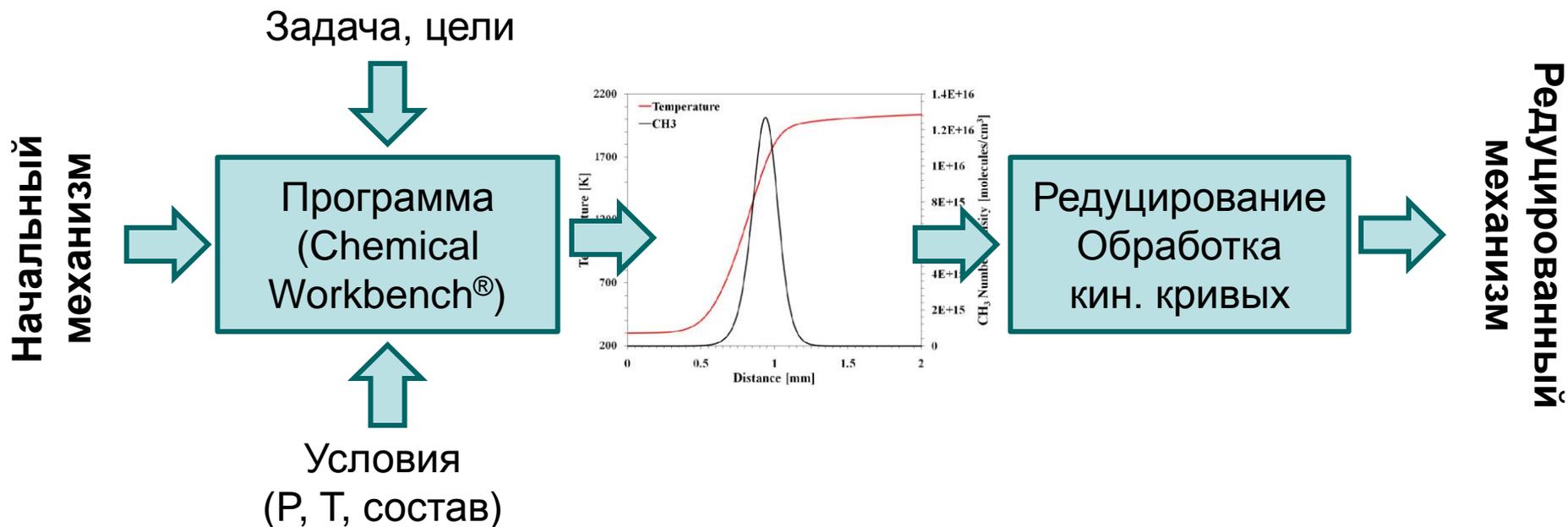


Размер детальных кинетических схем для горения суррогатов реальных топлив делает невозможным практическое гидродинамическое моделирование процессов горения

Что такое редуцирование механизмов?

Тип механизма	Характеристики механизма
Детальный	<ul style="list-style-type: none">• Сотни веществ, тысячи реакций для типичных углеводов• Предполагается, что работают в широком диапазоне условий• НО стоит протестировать
Скелетный	<ul style="list-style-type: none">• Десятки веществ, сотни реакций для типичных углеводов• Обычно получаются из детальных• Получены для узкого диапазона условий, иногда для узко-специализированной задачи• Необходимо тестирование для требуемого диапазона условий
Редуцированный	<ul style="list-style-type: none">• Десятки веществ, десятки/сотни реакций для типичных углеводов• Получаются из скелетных в результате применения методов квазистационарных концентраций, квазиравновесных реакций• Получены для узкого диапазона условий, иногда для узко-специализированной задачи• Необходимо тестирование для требуемого диапазона условий
Глобальный	<ul style="list-style-type: none">• Не может быть выведен непосредственно из упомянутых выше механизмов• Может применяться только для очень ограниченного диапазона условий, только для одного типа задач• ДОЛЖЕН тестироваться для каждого нового приложения

Что такое редуцирование механизмов?



Процесс	Задача	Цели
Самовоспламенение	<ul style="list-style-type: none"> Ударная труба Проточный реактор 	<ul style="list-style-type: none"> Время самовоспламенения Профили: вещества, температура
Ламинарное пламя	<ul style="list-style-type: none"> Бунзеновская горелка Диффузионное пламя 	<ul style="list-style-type: none"> Скорость распространения пламени Пределы погасания Профили: вещества, температура
Турбулентное пламя	<ul style="list-style-type: none"> Струйный реактор 	<ul style="list-style-type: none"> Концентрация веществ

Что такое редуцирование механизмов?

Подход	Цель редуцирования	Теоретическая методика	Примеры методов и алгоритмов
Анализ потоков атомов и веществ	Вещества, реакции	Reaction paths	ROP, DRG, DRGEP
Анализ масштабов времени	Вещества, реакции	CSP	Time scale analysis, importance index analysis
Анализ чувствительности	Вещества, реакции	PCA	Species or rates sensitivity matrix analysis

Демо: работа с модулем редуцирования

	Processes	Include	By Process
275	$O + O + M \rightleftharpoons O_2 + M$	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> 1
276	$O + H + M \rightleftharpoons OH + M$	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> 1
277	$OH + OH + M \rightleftharpoons H_2O_2 + M$	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> 1
278	$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> 1
279	$H + O_2 + N_2 \rightleftharpoons HO_2 + N_2$	<input type="checkbox"/>	

Models

DRG

▶ Run

Property	Value
Substances	O2 H2O H2 C10H22;/;/n/
index/max_index ratio thr...	0.1

- Библиотека современных алгоритмов редуцирования (DRG, CSP, ROP, PCA)
- Интеграция с программным комплексом Chemical Workbench

23	$C_3H_{11}(1)$	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> 1
24	C_3H_4O	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> 0.951338
25	C_3H_5	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> 0.999977
26	C_3H_6	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> 0.061886
27	C_3H_9	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> 1
28	C_6H_{11}	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> 0.738139
29	$C_6H_{12}(1)$	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> 1
30	$C_6H_{12}(2)$	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> 1
31	$C_6H_{12}(3)$	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> 0.960339

Reaction pathway diagram

t (s) = 9.939174E-02
par: Temperature = 1.400000E+03

500 4.96227e-05 2000

501 0.000125150 2000

Reaction Path Save Close

Рекомендации по редуцированию кинетических механизмов

Тестовая задача:

- Само-воспламенение
- Стехиометрическая смесь н-гептан/воздух 1 bar
- 650 – 2000K
- 1 атм

Кинетический механизм:

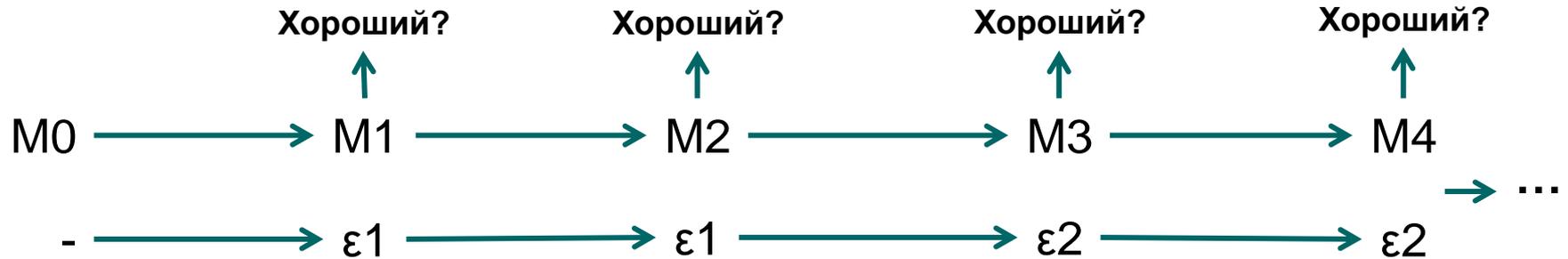
- Curran, H. J., P. Gaffuri, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook, "A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation" Combustion and Flame 114:149-177 (1998)

Цель:

- Время самовоспламенения
- 10% - максимальная ошибка в расчете между детальным и редуцированным механизмами

Рекомендации по редуцированию кинетических механизмов

Установка числовых параметров метода редуцирования



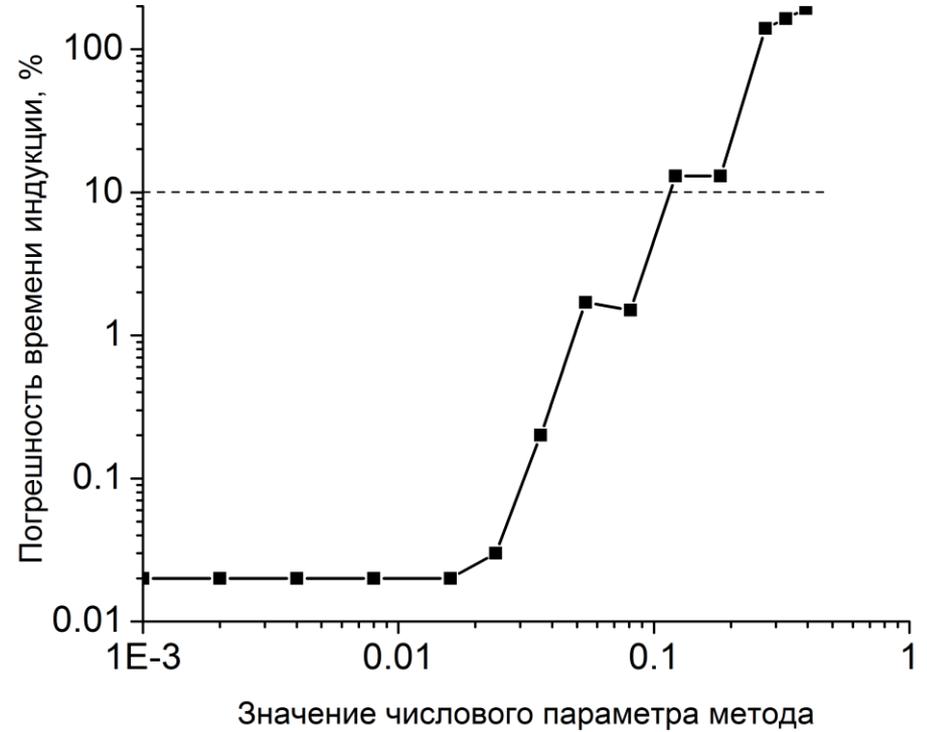
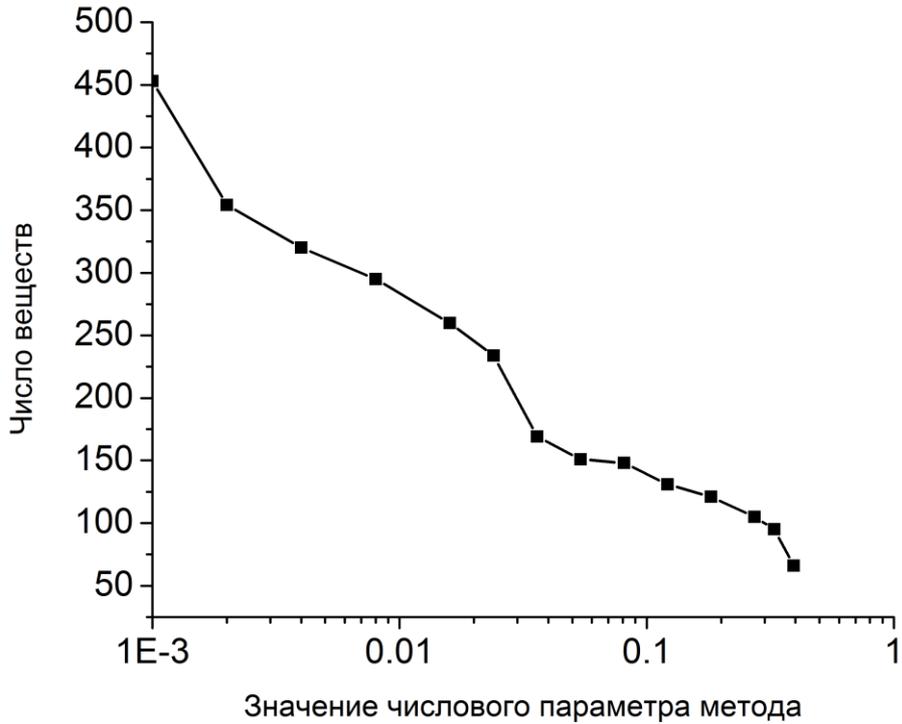
Числ. парам	Итерация #1(err)	Итерация #2(err)	Итерация #3(err)
0.002	-207(err 0.02%)	-21(err 0.02%)	-2(err 0.02%)
0.004	-241(err 0.02%)	-28(err 0.02%)	-4(err 0.02%)
0.008	-266(err 0.02%)	-27(err 0.02%)	-4(err 0.02%)
0.016	-301(err 0.02%)	-25(err 0.02%)	-2(err 0.02%)
0.024	-327(err 0.03%)	-26(err 0.03%)	-1(err 0.03%)
0.036	-392(err 0.2%)	-36(err 0.3%)	-4(err 0.3%)
0.054	-410(err 1.7%)	-38(err 1.7%)	-1(err 1.7%)
0.081	-413(err 1.5%)	-33(err 0.7%)	-4(err 0.7%)

↑
Степень редуцирования

↑
Ошибка расчета
времени воспламенения

Рекомендации по редуцированию кинетических механизмов

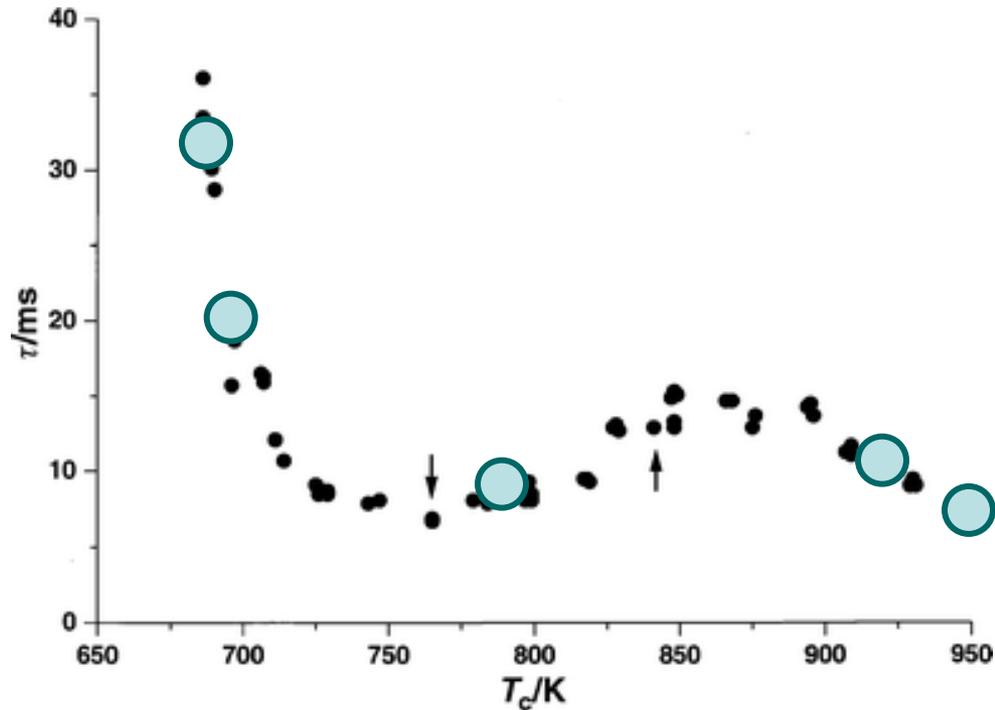
Установка числовых параметров метода редуцирования



Рекомендации по редуцированию кинетических механизмов

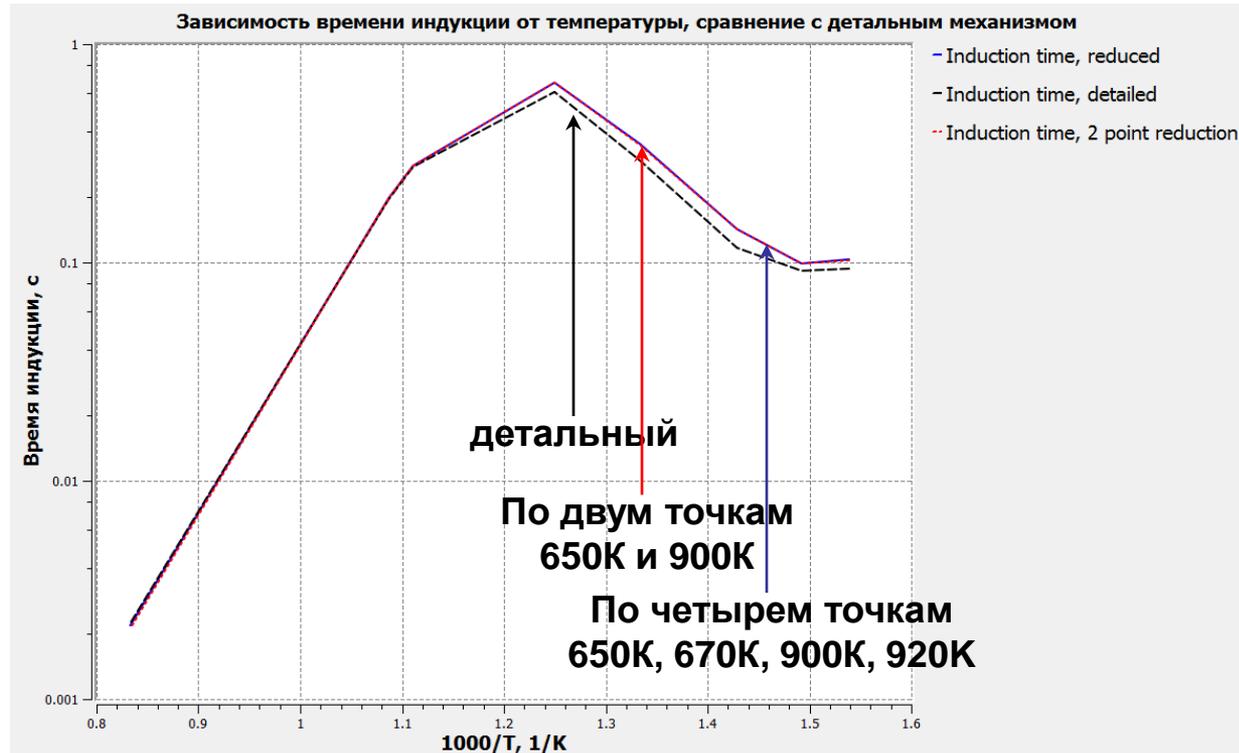
Редуцирование механизма в диапазоне условий

Отрицательный температурный коэффициент:
Как много точек выбрать для редуцирования, чтобы сохранить точность редуцированного механизма приемлемо во всем диапазоне условий?



Рекомендации по редуцированию кинетических механизмов

Редуцирование механизма в диапазоне условий



Для эффективной генерации редуцированного кинетического механизма в диапазоне условий достаточно взять по одной точке в каждом их характерных диапазонов условий. Например, одну точку в области высоких температур и одну точку в области низких температур

Рекомендации по редуцированию кинетических механизмов

Применение комбинации методов

Шаг 1

Удаление неважных веществ:

- Остаются только вещества, необходимые для описания процесса в заданных условиях
- Также удаляется большое количество реакций

Методы, основанные на анализе потоков атомов:
DRG, DRGEP



Шаг 2

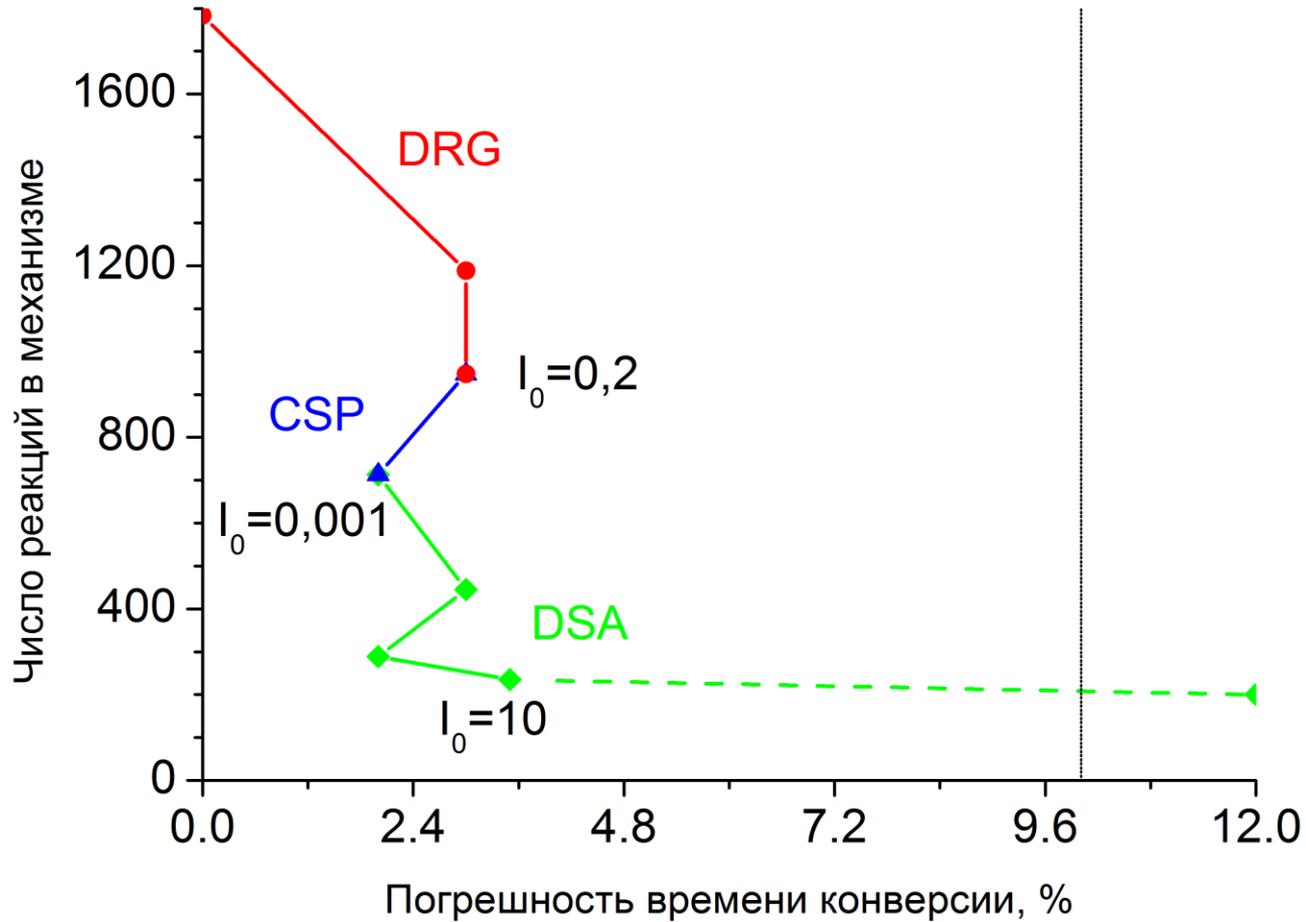
Удаление неважных реакций

- Могут оставаться малозначащие реакции, которые удаляются

Методы анализа масштабов времени:
CSP-based
Анализ чувствительности:
PCA-, PCAF-based

Рекомендации по редуцированию кинетических механизмов

Применение комбинации методов



Кинтех Лаб: Контакты

Получите демо-версию: evaluation@kintechlab.com

Задайте технические вопросы: support@kintechlab.com

Отдел продаж: sales@kintechlab.com

Вебинар – обратная связь: webinars@kintechlab.com

Наш сайт: www.kintechlab.com

