

# Редуцированный механизм горения метана для моделирования горелочных устройств ГТУ

## Введение

Конструирование горелочных устройств газовых турбин (как промышленных, так и транспортных) с низким уровнем выбросов токсичных веществ вряд ли возможно без вычислительного анализа. Этот анализ позволяет определить и тепловыделение, и образование загрязняющих веществ, помогает понять поведение системы изнутри. При моделировании эти химические явления необходимо воспроизводить как можно точнее. Для обеспечения этой возможности были разработаны подробные химические механизмы горения природного газа. Единственная проблема заключается в том, как использовать эти большие (сотни веществ, тысячи реакций) химические механизмы в полномасштабных симуляторах CFD.

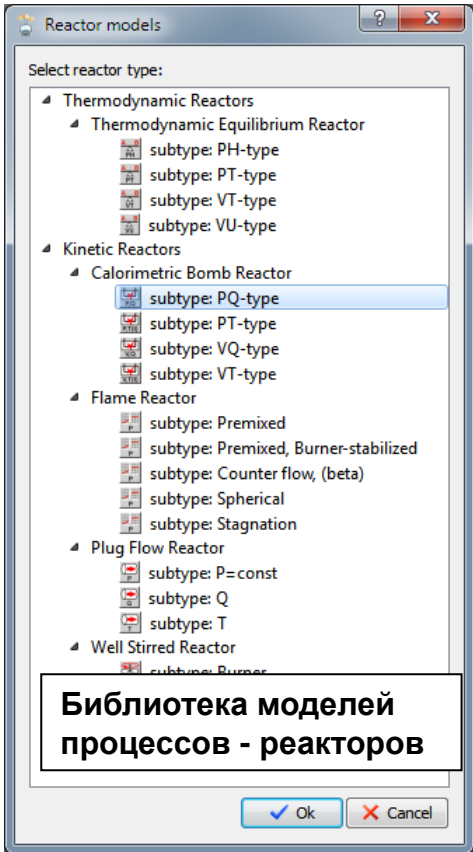
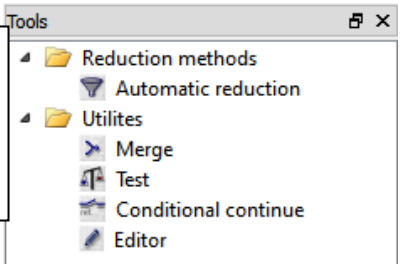
## Постановка задачи

Требуется уменьшить размер механизма горения метана [1], при этом отклонение температуры в турбулентном горении, предсказанное редуцированным механизмом, не должно отличаться от детального механизма более, чем на 100 К при следующих целевых условиях: от обедненной до обогащенной смеси метана и воздуха, начальная температура 650 К, давление 17 атм, диапазон времени пребывания в турбулентных вихрях  $10^{-8}$  - 1 с.

## Решение задачи в Chemical Workbench

Для редуцирования механизма в Mechanism Workbench использовался инструмент **Automatic Reduction** с использованием высокоэффективного алгоритма Kintech Lab. Удалялись как избыточные для указанных условий вещества, так и реакции.

**Операции над детальным и редуцированным механизмами в CWB**



**Библиотека моделей процессов - реакторов**

Следующие процессы горения рассматривались при редуцировании

- Турбулентное горение (соответствующая модель процесса – реактор идеального смешения – **WSR Burner**), диапазон времён пребывания покрывает все возможные значения времён пребывания в турбулентных вихрях.

Для редуцирования выбраны следующие цели:

- Для турбулентного горения
  - Температура (максимальная привносимая ошибка – 100 К)
  - Правильное определение критического времени пребывания, когда реакция тушится

**Задание целей редуцирования**

	Data for comparison	Rel. tolerance	Abs. tolerance	Comparison method
1	T (K)	0	50	Deviation of only value
2	NO	0.1	0	Deviation of only value

## Результаты

На Intel Core i7 редуцирование механизма было выполнено за 5 минут. Оно не требовало мониторинга во время выполнения и выполнялось автоматически.

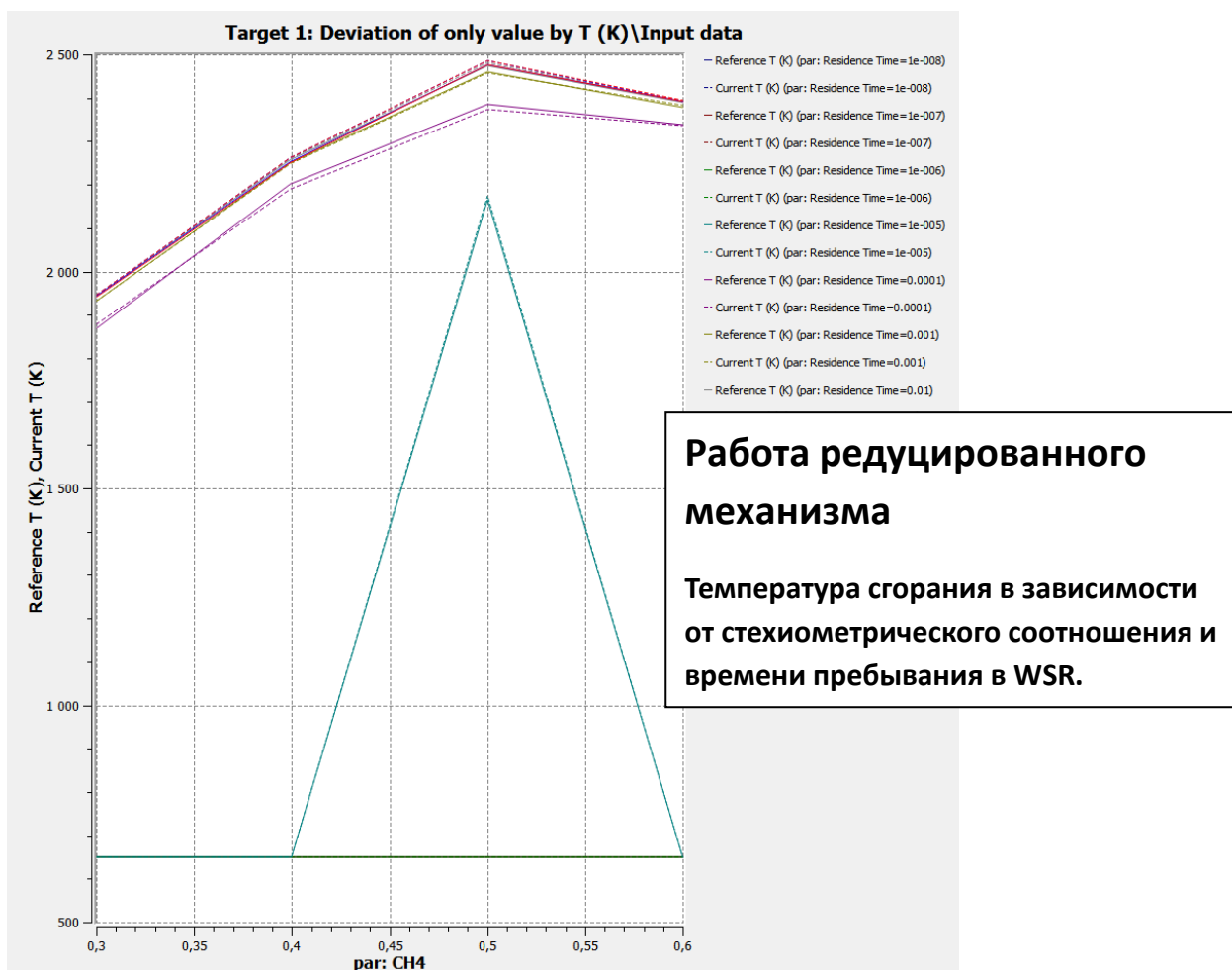
Исходный механизм включал

- 53 вещества
- 325 реакций

После редуцирования механизм включает

- 19 веществ
- 27 реакций

Редуцированный механизм способен моделировать требуемые характеристики горения (значение температуры и гашение реакции) с требуемой точностью при заданных условиях.



## Следующие шаги

Этот пример может быть исследован дальше

1. Добавить концентрации NO и CO в качестве целей для расширения возможности механизма предсказывать образование вредных веществ.

## Литература

[1] Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr., Vitali V. Lissianski, and Zhiwei Qin [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)