

*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

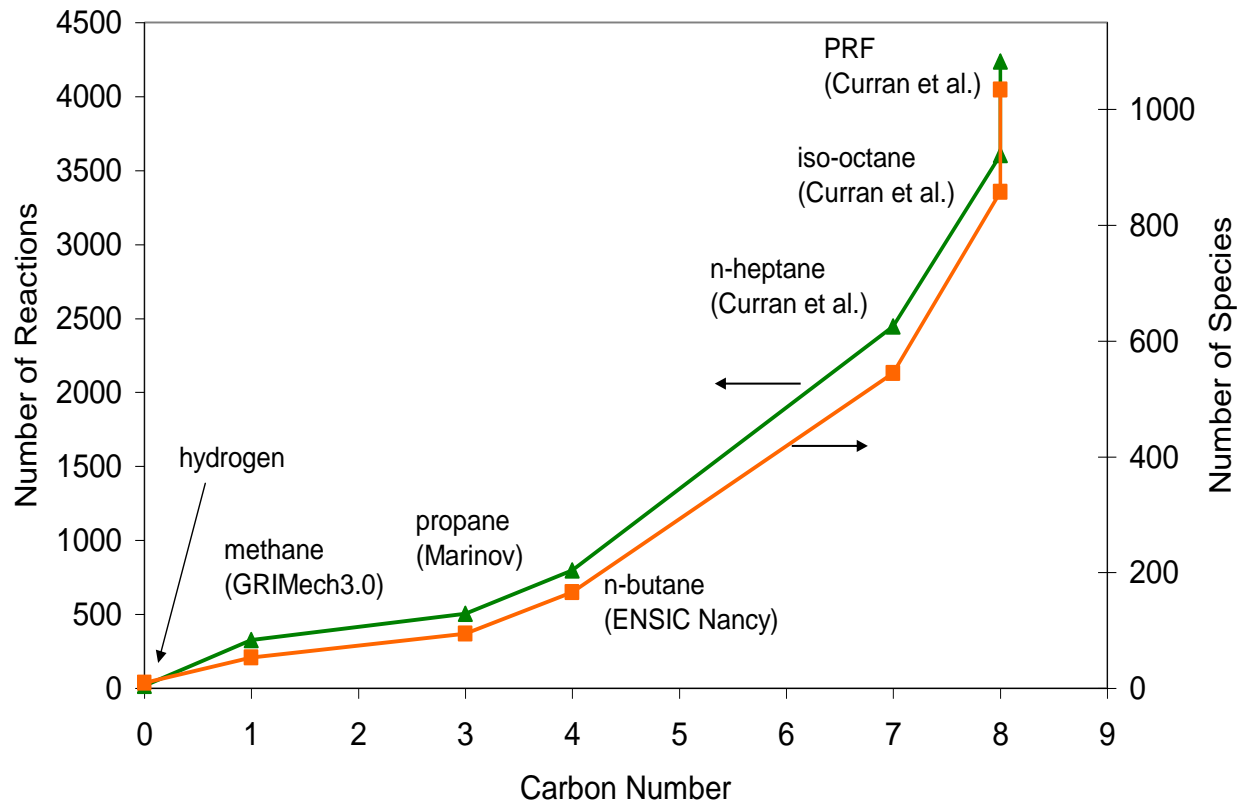
## Деятельность компании:

- ✓ 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?

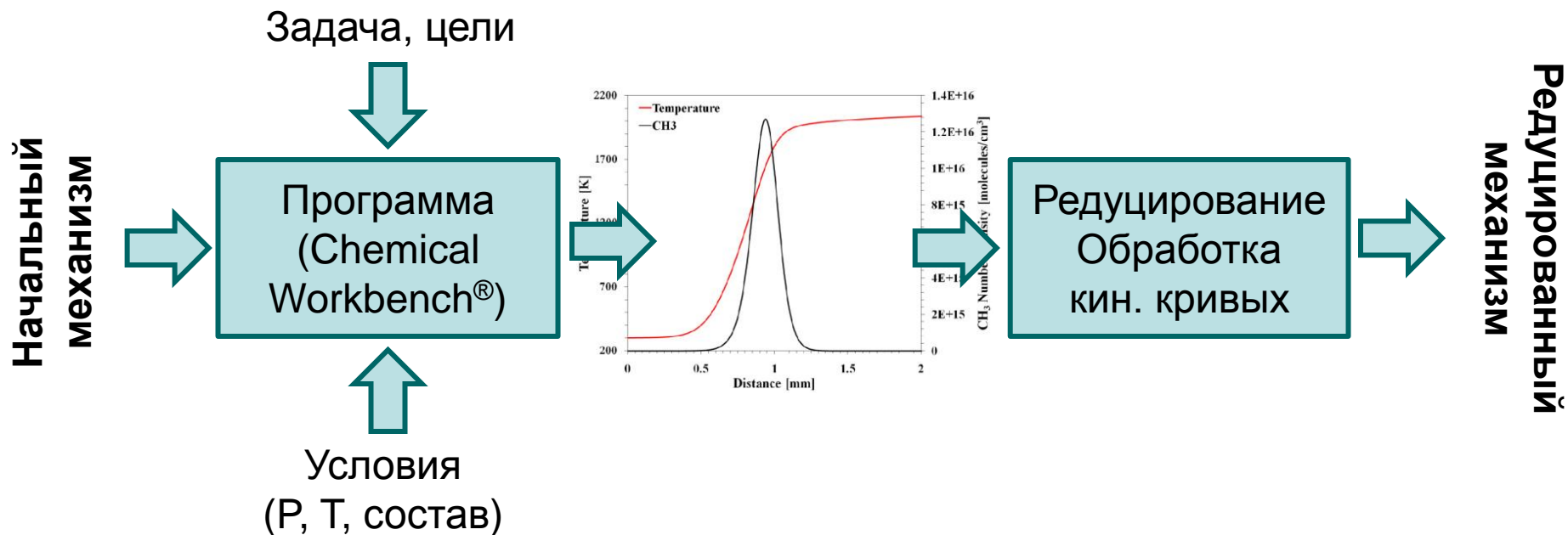


Размер детальных кинетических схем для горения суррогатов реальных топлив делает невозможным практическое гидродинамическое моделирование процессов горения

# Что такое редуцирование механизмов?

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

# Что такое редуцирование механизмов?



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

# Что такое редуцирование механизмов?

Подход	Цель редуцирования	Теоретическая методика	Примеры методов и алгоритмов
<b>Анализ потоков атомов и веществ</b>	Вещества, реакции	Reaction paths	ROP, DRG, DRGEP
<b>Анализ масштабов времени</b>	Вещества, реакции	CSP	Time scale analysis, importance index analysis
<b>Анализ чувствительности</b>	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:

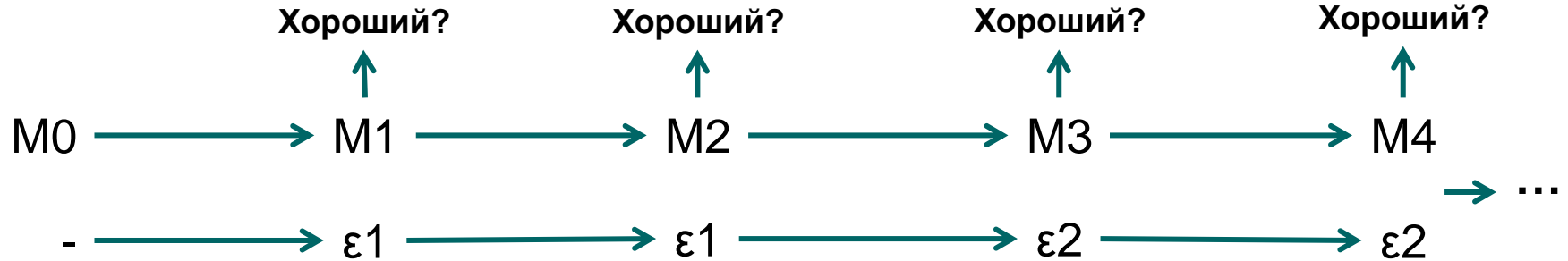
- Curran, H. J., P. Gaffuri, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook, "A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation" Combustion and Flame 114:149-177 (1998)

## Цель:

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

# Рекомендации по редуцированию кинетических механизмов

## Установка числовых параметров метода редуцирования



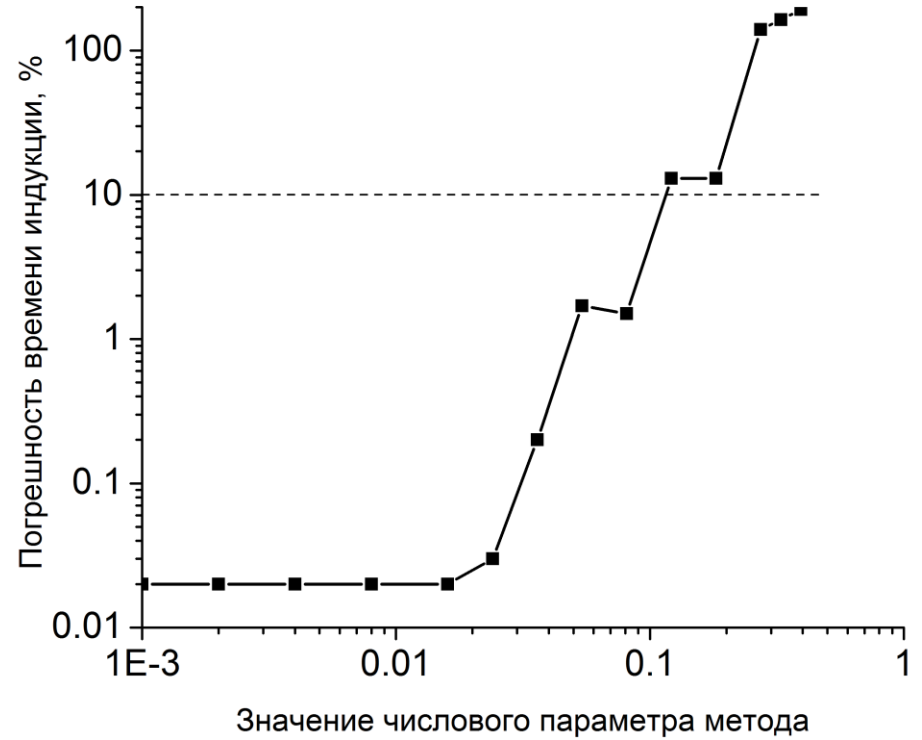
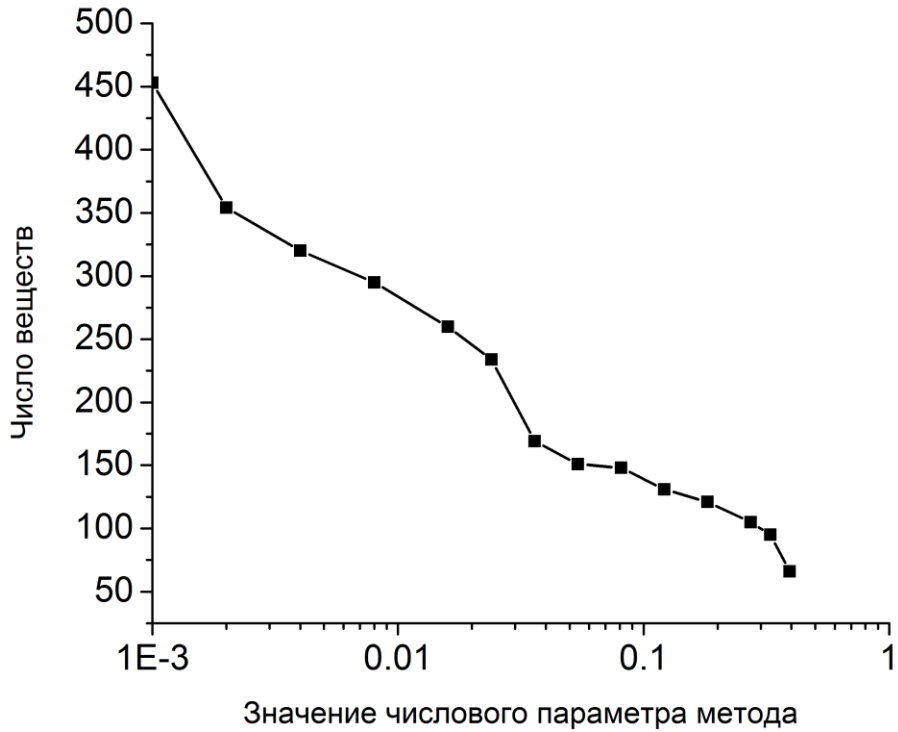
Числ. парам	Итерация #1(err)	Итерация #2(err)	Итерация #3(err)
0.002	-207(err 0.02%)	-21(err 0.02%)	-2(err 0.02%)
0.004	-241(err 0.02%)	-28(err 0.02%)	-4(err 0.02%)
0.008	-266(err 0.02%)	-27(err 0.02%)	-4(err 0.02%)
0.016	-301(err 0.02%)	-25(err 0.02%)	-2(err 0.02%)
0.024	-327(err 0.03%)	-26(err 0.03%)	-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

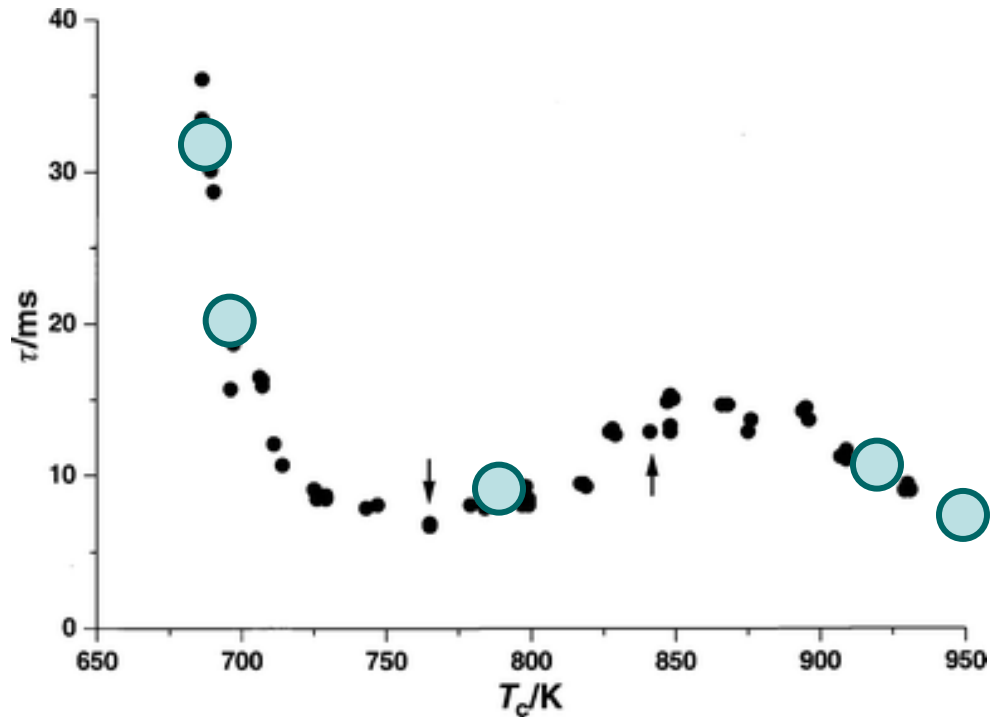
## Установка числовых параметров метода редуцирования



# Рекомендации по редуцированию кинетических механизмов

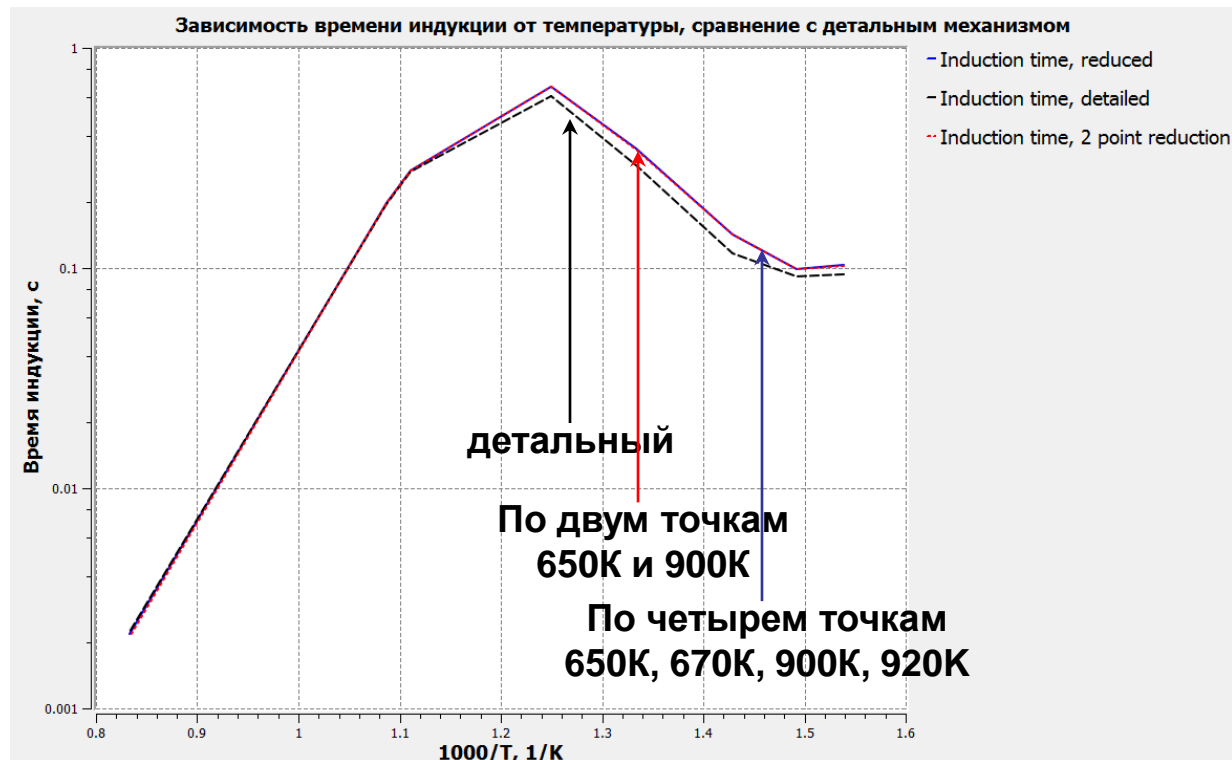
## Редуцирование механизма в диапазоне условий

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

## 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

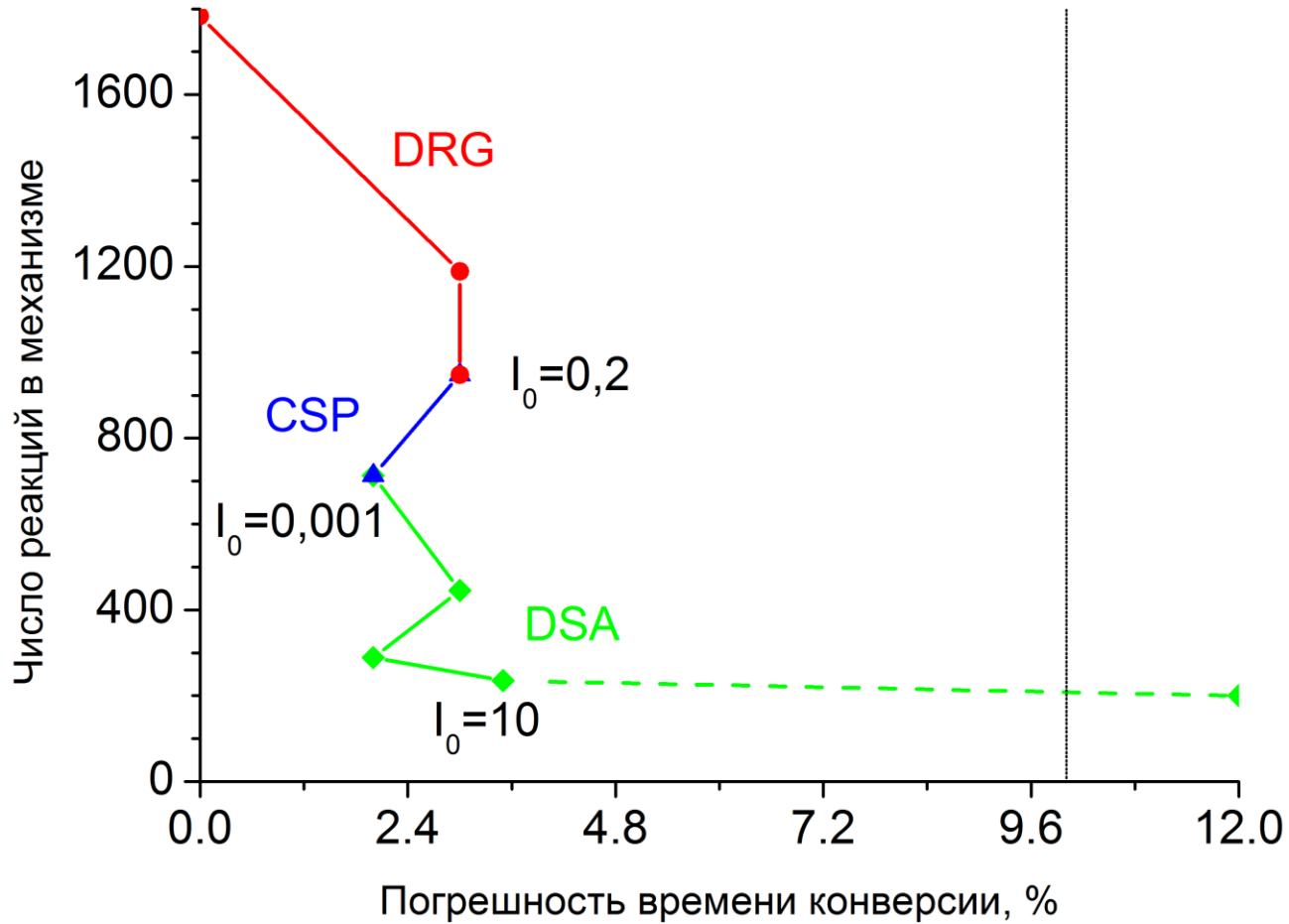
- Могут оставаться малозначащие реакции, которые удаляются

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](mailto:evaluation@kintechlab.com)

Задайте технические вопросы: [support@kintechlab.com](mailto:support@kintechlab.com)

Отдел продаж: [sales@kintechlab.com](mailto:sales@kintechlab.com)

Вебинар – обратная связь: [webinars@kintechlab.com](mailto:webinars@kintechlab.com)

Наш сайт: [www.kintechlab.com](http://www.kintechlab.com)

