

Simulering av förbränning

När man räknar på förbränning, det vill säga eld, är det viktigt att hålla koll på vart de olika ämnena i lågan tar vägen. Därför är det viktigt att veta hur man beräknar diffusion så bra som möjligt.

Vi människor har eldat saker sedan förhistorisk tid och fortfarande i "atomåldern" kommer mellan 80 och 90 procent av vår elproduktion från olika former av förbränning. Det gör att det är viktigt att förstå förbränningen, så att vi kan få den så effektiv som möjligt och därmed få ut maximal energi från det vi bränner. Förbränning är dock en snabb process med många kortlivade molekyler, vilket gör det svårt att studera den rakt av. I syfte att komma runt det använder vi simuleringar. Genom att testa att simulera någon egenskap som är mätbar, till exempel flamhastigheten, kan vi kontrollera att simuleringarna ger rimliga resultat. Flamhastigheten är hastigheten en flamma breder ut sig med, i en jämnt blandad gas.

Diffusion, vilket är hur ämnena rör sig i förhållande till varandra, är en viktig del av hur fort flammen kan förflytta sig. Det innebär att om den beräknade flamhastigheten stämmer överens med den som mätts upp i experiment, kan man rimligen anta att beräkningen är realistisk. Detta innebär att diffusionen är en betydande del av beräkningarna, och det är viktigt att få den rätt.

Resultat

På LOGE AB har de tagit fram ett program för att simulera förbränning av olika ämnen. Det jag har tittat på är två olika sätt att beskriva diffusion. Det första sättet förenklar det hela genom att, för varje ämne, betrakta alla andra ämnen som en blandning av molekyler vars hastighet inte beror på ämnet. Detta minskar mängden beräkningar som behöver göras, och gör därmed den metoden snabb. Det andra sättet gör en mer korrekt beskrivning, men kräver fler och mer komplicerade beräkningar.

Dock har jag inte kommit till slutsatsen att den mer avancerade metoden är bättre, vilket kan bero på flera faktorer. Till exempel är en del kemiska parametrar anpassade för att ge så bra resultat som möjligt med den första metoden, som är den som användes av simulationen tidigare. Det innebär dock inte att den mer avancerade metoden skall överges, bara att den behöver studeras mer.