

Snabbare förbränningsmodeller

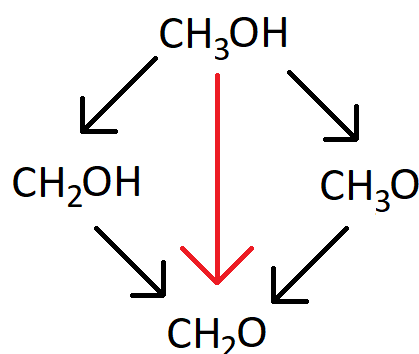
En trevlig brasa, en elegant sportbil och ett bolmande kolkraftverk har en sak gemensam, alla tre kräver att något förbränns för att de ska fungera. Det är mycket i dagens samhälle som får sin energi från förbränning. Vissa saker direkt via en förbränningsmotor, andra saker indirekt från elektricitet som har framställts genom förbränning.

Allt är dock inte frid och fröjd. Stora mängder fossila bränslen används, vilket har lett till den globala uppvärmningen. Många luftföroreningar skapas också vid förbränning, vilket har lett till att mycket tid och energi har lagts ner för att hitta bättre, mer miljövänliga metoder. Dessa metoder är dock inte färdiga än och därför forskar man på bättre förbränningsmetoder. Experiment ger mycket data, men det är vanligt att simuleringar används som komplement eller för att ge en mer detaljerad insikt.

Man kunde lätt föreställa sig att ett så viktigt verktyg som förbränning skulle vara helt förstått. Att vetenskapsmän lätt skulle kunna beräkna resultatet efter vilken given förbränning som helst, men så är det inte. Anledningen till detta är att förbränningsmodeller tar för lång tid. För att förstå hur bränslen förbränns har vetenskapsmän skapat detaljerade mekanismer. De detaljerade mekanismerna är i princip listor som innehåller alla reaktioner som händer vid en förbränning och alla ämnen som skapas under förbränningen. Dessa mekanismer är tyvärr alldeles för stora för att de skulle kunna användas i simuleringar. De innehåller hundratals ämnen och tusentals reaktioner, vilket är anledningen till att mekanismer oftast reduceras innan de används. Målet med mitt kandidatarbete är att skapa metoder som tar en detaljerad mekanism och skapar genvägar i den. Sedan används ett annat program som reducerar mekanismernas längd och en genvägarna ska då ersätta flera reaktioner.

Förenklingsmetoderna

Den första metoden använder att flera av ämnena kan bildas på flera sätt. Ett exempel är när metanol, CH_3OH , blir till formaldehyd, CH_2O . Metanolen kan antingen först förlora väteatomen som är bunden till syret och sedan väteatomen som är bunden till kolet, eller tvärt om. Metoden skapar reaktioner som går direkt från metanolen till formaldehyden. En bild av detta kan ses till höger. Anledningen till att många sådana genvägar skapas är för att metanolen kan förlora väteatomerna till många olika ämnen och alla varianter måste vara representerade.



Den andra metoden använder att olika reaktioner sker olika snabbt och tidskalorna kan variera kraftigt. Metoden letar efter ämnen som huvudsakligen bildas eller förbrukas av en reaktion och sedan skapar den reaktioner som hoppar över ämnena.

Handledare: **Elna Heimdal Nilsson, Christoffer Pichler**

Examensarbete 15 hp i fysik 2019

Förbränningsfysik, Lunds Universitet

Kandidatarbete, Naturvetenskap, Lunds universitet