



*От атомов и молекул  
к новым материалам и технологиям*

**Chemical Workbench:**

инструмент для разработки химических моделей и  
концептуального дизайна процессов в реагирующих средах

26 февраля 2015

# Обзор вебинара

1. О Компании
2. Концептуальный дизайн: принципы моделирования
3. Библиотека моделей процессов в реагирующих средах
4. **Демо:** термодинамический цикл газо-турбинной установки
5. **Демо:** переработка  $H_2S$
6. Инструменты для разработки и верификации химических механизмов процессов
7. **Демо:** верификация кинетического механизма горения авиационного керосина - время задержки воспламенения
8. **Демо:** анализ чувствительности механизма горения метана
9. База данных KintechDB – системе хранения физико-химической информации по свойствам веществ и процессов

## О компании

Компания «Кинтех Лаб» основана в 2000 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

## О компании

**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.

# Концептуальный дизайн: принцип моделирования



Оптимальные условия осуществления процесса:  
расходы реагентов, температура, давление, стадии,  
времена пребывания, геометрические размеры...



Инженерный дизайн: 3D-проектирование, 3D-моделирование

# Концептуальный дизайн: принцип моделирования

## Подход:

- Упрощенное описание гидродинамики процесса
- Акцент на интегральных и термодинамических условиях осуществления процесса
- Акцент на описании химических превращений

## Chemical Reactor Networks (CRN)

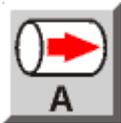
- **3 базовых типа течения:** замкнутый объем (CBR), идеальное вытеснение (PFR), идеальное смешение (WSR): позволяют исключить уравнения для расчета потока, оперируют с интегральными характеристиками системы
- Появляется возможность включить в расчет **кинетические схемы практически любой сложности**
- Может быть включена **дополнительная физика**, например, неравновесная плазма, дисперсная фаза и т.д.

**Chemical Workbench** – интегрированная среда для концептуального дизайна физико-химических процессов, разработки и редуцирования химических кинетических механизмов.

## КИНЕТИКА ...



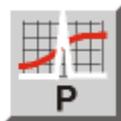
Well Stirred Reactor (WSR) – Реактор идеального смешения – кинетически лимитируемый процесс в условиях интенсивного турбулентного перемешивания и однородного распределения реагентов и температуры по объему реактора (2 модели)



Plug Flow Reactor (PFR) – Реактор идеального вытеснения – кинетическая модель, описывающая изменение состава реагирующей смеси вдоль потока в одномерном приближении и предположении об отсутствии диффузионного переноса (3 модели)

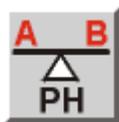


Calorimetric Bomb Reactor (CBR) – Реактор замкнутого объема – описывает изменение во времени состава реагирующей смеси и ее термодинамических параметров как функцию времени в ходе реакций, а также под воздействием внешних факторов (теплообмен) (4 модели)



Flame – Модель адиабатического одномерного ламинарного пламени в предварительно перемешанных и не перемешанных смесях для расчет скорости распространения пламени и его структуры

## ... термодинамика ...

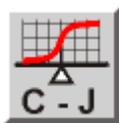


Thermodynamics Equilibrium Reactor (TER) – Реактор полного термодинамического равновесия - для расчета равновесного состава и термодинамического состояния гомогенных и гетерогенных систем (4 модели)



Stoichiometric Thermodynamically Equilibrium Reactor (STR) – Реактор частичного термодинамического равновесия – для расчета химического равновесия в многокомпонентных системах по заданным каналам химических реакций (4 модели)

## ... детонация ...



Chapman-Jouguet Detonation Reactor (CJD) – Реактор детонации Чепмена-Жуге для расчета статических параметров детонационной волны на основе термодинамических свойств реагирующей смеси

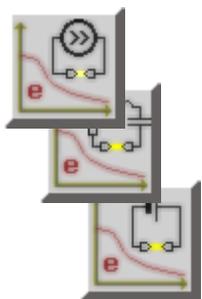


Zeldovich-Neumann-Doering Reactor (ZND) – Реактор детонации Зельдовича-Неймана-Деринга для расчета структуры идеальной одномерной детонационной волны на основе кинетического механизма химических реакций

# Концептуальный дизайн: библиотека моделей

## ... неравновесная плазма...

VIBRKIN reactors (VIBR) – модели неравновесной химически активной плазмы на основе расчета ФРЭЭ, учитывая элементарные процессы с участием электронов и колебательно возбужденных частиц



- Glow discharge model (источники света)
- LCR circuit model (лазерные системы)
- Pulse discharge model (коронный разряд)

## ... поверхность ...

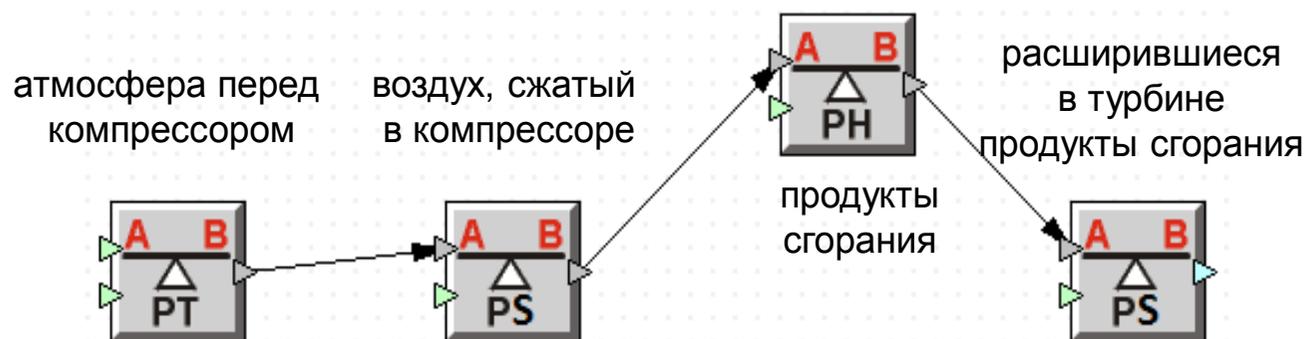
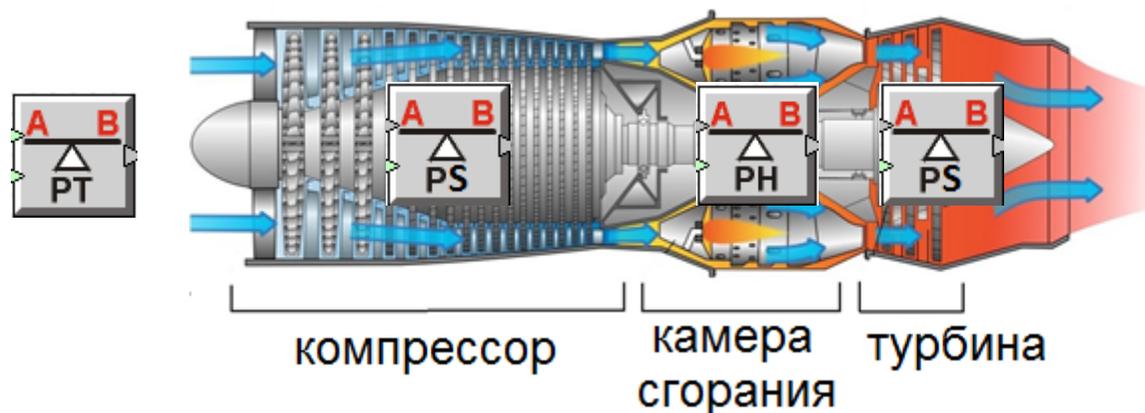


CBR with surface (расширенная версия реактора CBR, для одновременного расчета реакций в газе и на поверхности раздела фаз)

WSR with surface (расширенная версия реактора WSR, для одновременного расчета реакций в газе и на поверхности раздела фаз)

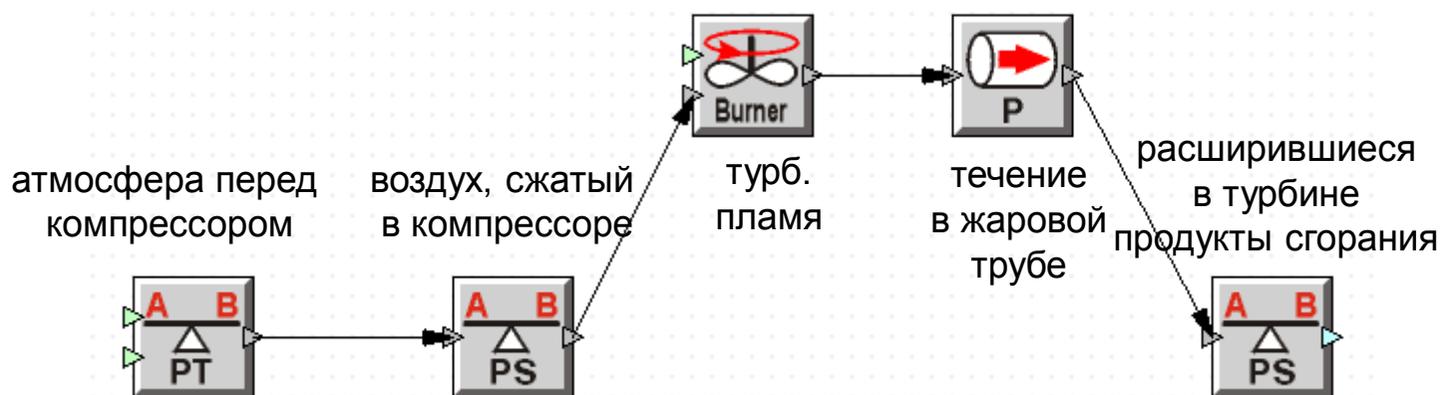
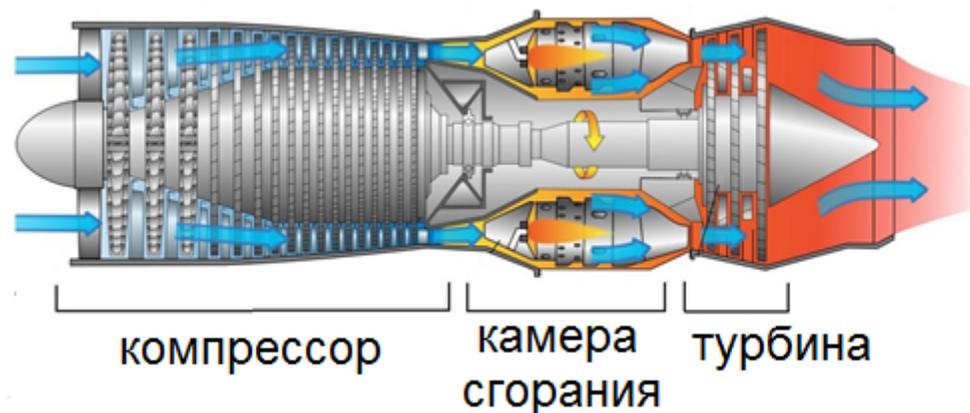
PFR with surface (расширенная версия реактора PFR, для одновременного расчета реакций в газе и на поверхности раздела фаз)

# Концептуальный дизайн: Газовая турбина - 1



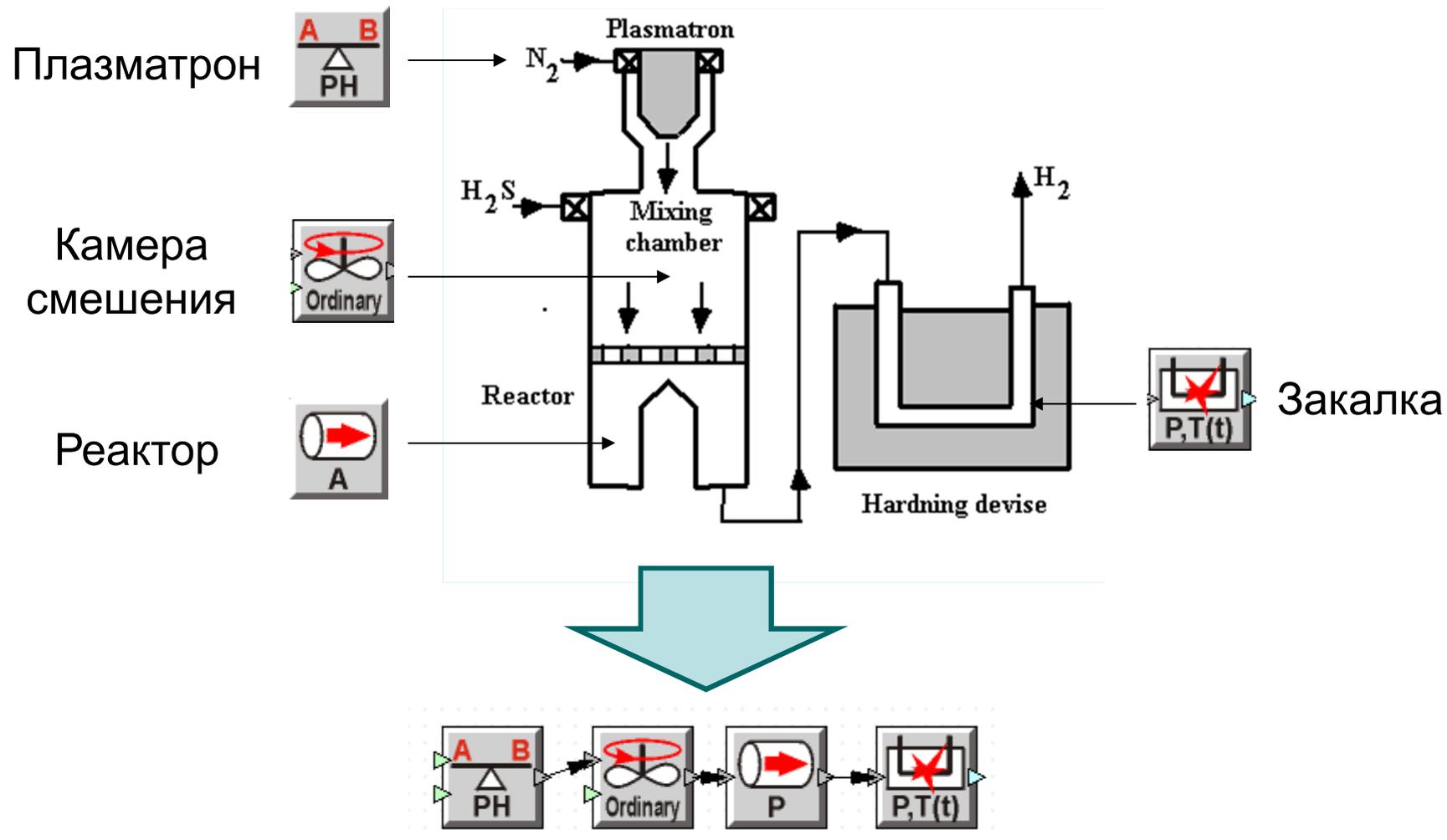
**ФОКУС:** КПД, температура воздуха за компрессором, температура продуктов сгорания и выхлопных газов

# Концептуальный дизайн: Газовая турбина - 2

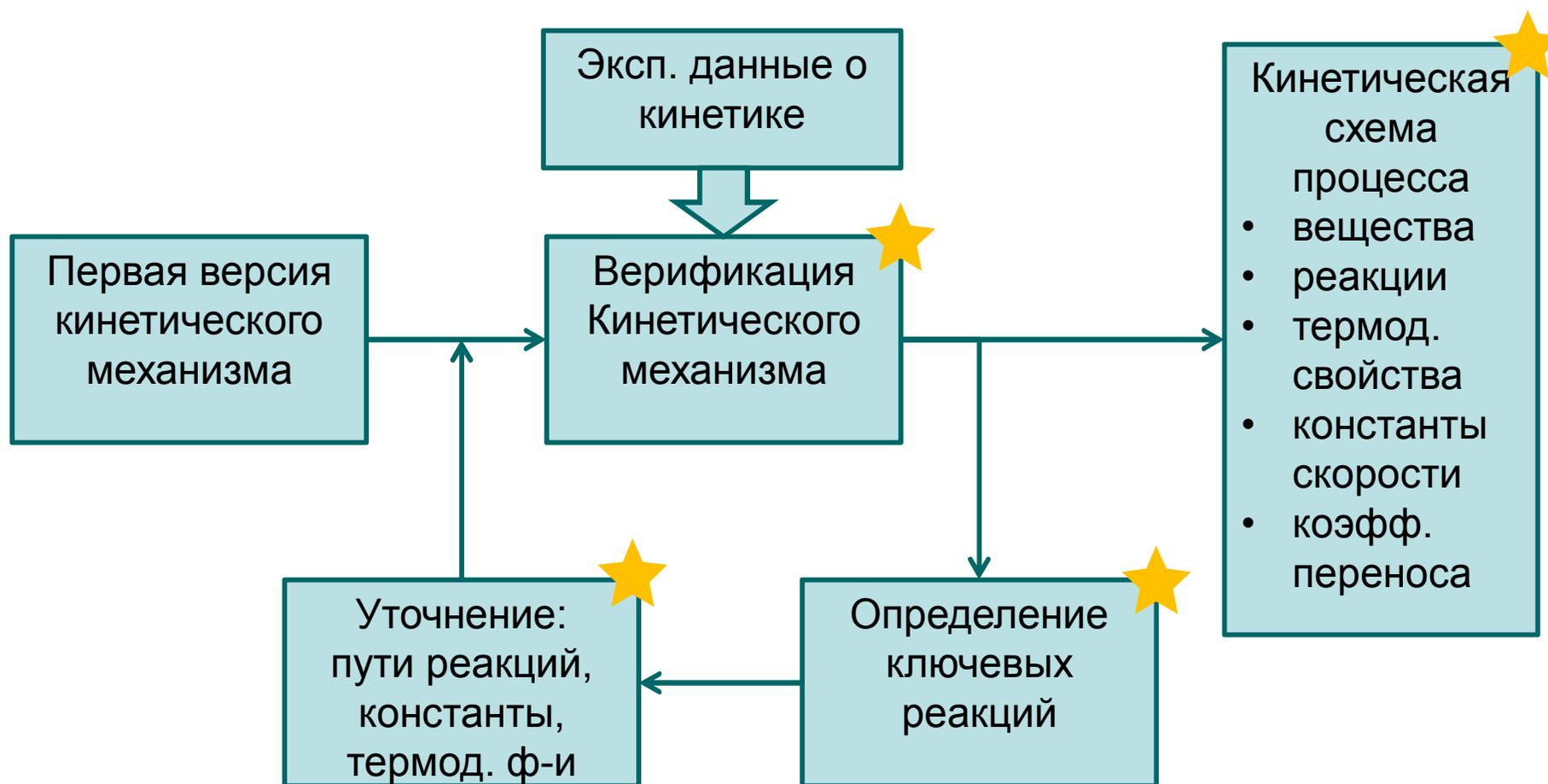


**ФОКУС:** устойчивость горения - влияния типа топлива, начальной температуры, промотирующих добавок

# Концептуальный дизайн: Переработка $H_2S$

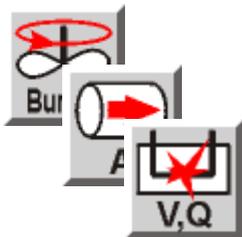


# Разработка и верификация химических механизмов

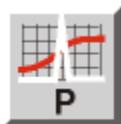


★ Решения «Кинтех Лаб»

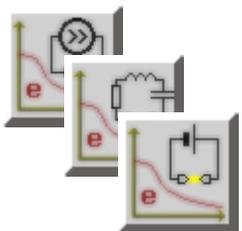
## МОДЕЛИ КИНЕТИЧЕСКИХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ...



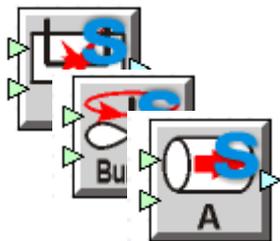
- Ударная труба, Машина быстрого сжатия (CBR),
- Проточный реактор (PFR),
- Реактор на встречных струях (WSR)



- Ламинарное пламя в перемешанной смеси,
- Бунзеновская горелка
- Диффузионное пламя на встречных потоках (заторможенное пламя)



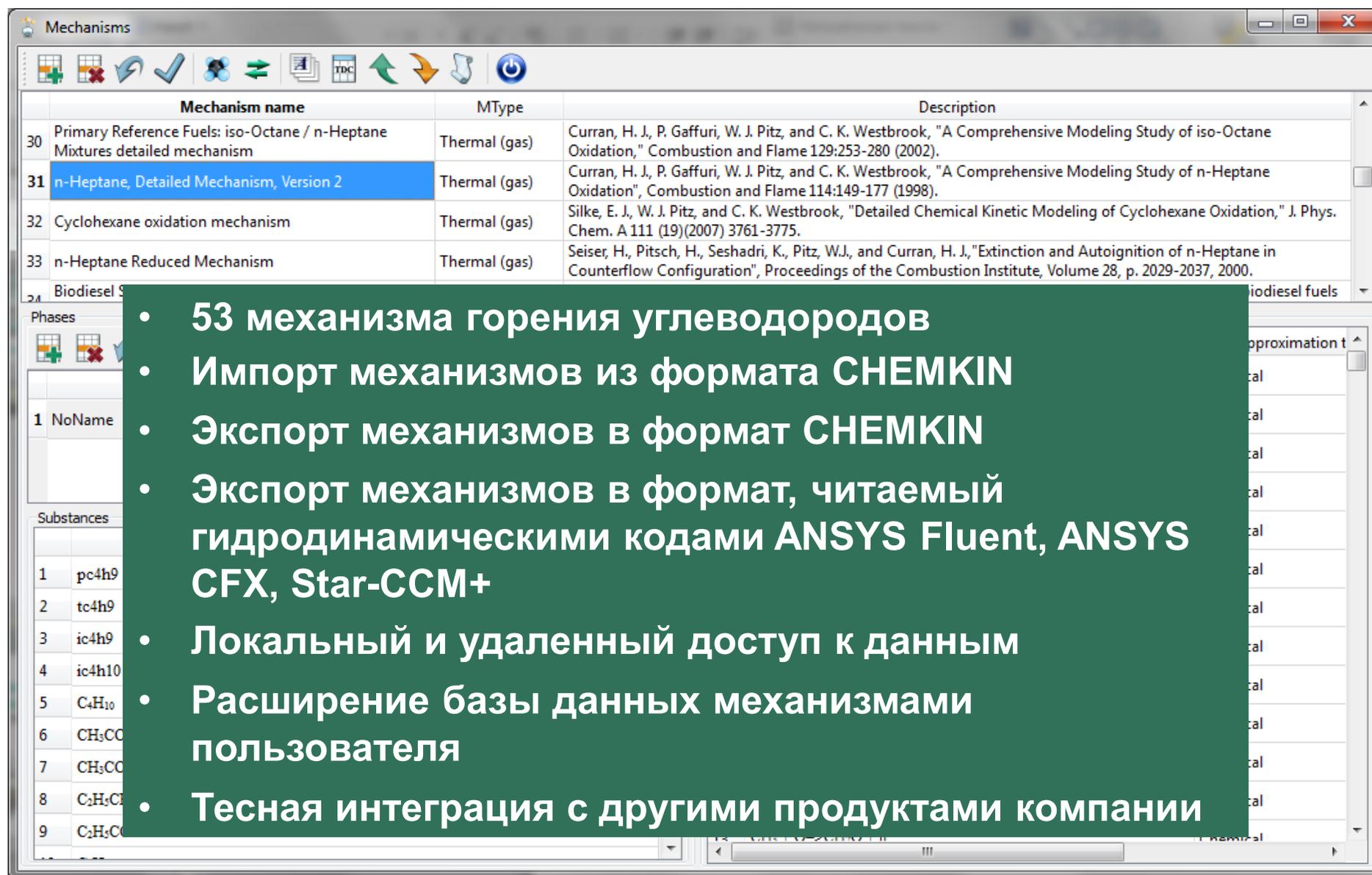
- Неравновесные электрические разряды



- Замкнутый реактор с засыпкой (CBR), кинетическое лимитирование
- Проточный реактор с засыпкой (PFR), кинетическое лимитирование
- Реактор на встречных струях с засыпкой (WSR), кинетическое лимитирование



# KintechDB



The screenshot shows the 'Mechanisms' window in KintechDB. It features a table with the following columns: Mechanism name, MType, and Description. The table lists several mechanisms, with 'n-Heptane, Detailed Mechanism, Version 2' highlighted in blue. Below the table, there are sections for 'Phases' and 'Substances'.

	Mechanism name	MType	Description
30	Primary Reference Fuels: iso-Octane / n-Heptane Mixtures detailed mechanism	Thermal (gas)	Curran, H. J., P. Gaffuri, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook, "A Comprehensive Modeling Study of iso-Octane Oxidation," Combustion and Flame 129:253-280 (2002).
31	n-Heptane, Detailed Mechanism, Version 2	Thermal (gas)	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).
32	Cyclohexane oxidation mechanism	Thermal (gas)	Silke, E. J., W. J. Pitz, and C. K. Westbrook, "Detailed Chemical Kinetic Modeling of Cyclohexane Oxidation," J. Phys. Chem. A 111 (19)(2007) 3761-3775.
33	n-Heptane Reduced Mechanism	Thermal (gas)	Seiser, H., Pitsch, H., Seshadri, K., Pitz, W.J., and Curran, H. J., "Extinction and Autoignition of n-Heptane in Counterflow Configuration", Proceedings of the Combustion Institute, Volume 28, p. 2029-2037, 2000.

Phases

1	NoName
---	--------

Substances

1	pc4h9
2	tc4h9
3	ic4h9
4	ic4h10
5	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>
6	CH <sub>3</sub> CO
7	CH <sub>3</sub> CO
8	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> Cl
9	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> Cl

- 53 механизма горения углеводородов
- Импорт механизмов из формата CHEMKIN
- Экспорт механизмов в формат CHEMKIN
- Экспорт механизмов в формат, читаемый гидродинамическими кодами ANSYS Fluent, ANSYS CFX, Star-CCM+
- Локальный и удаленный доступ к данным
- Расширение базы данных механизмами пользователя
- Тесная интеграция с другими продуктами компании

# 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)

