

*От атомов и молекул
к новым материалам и технологиям*

Разработка кинетических механизмов процессов
горения, катализа и образования токсичных веществ:
обзор инструментов компании Кинтех Лаб

27 апреля 2015

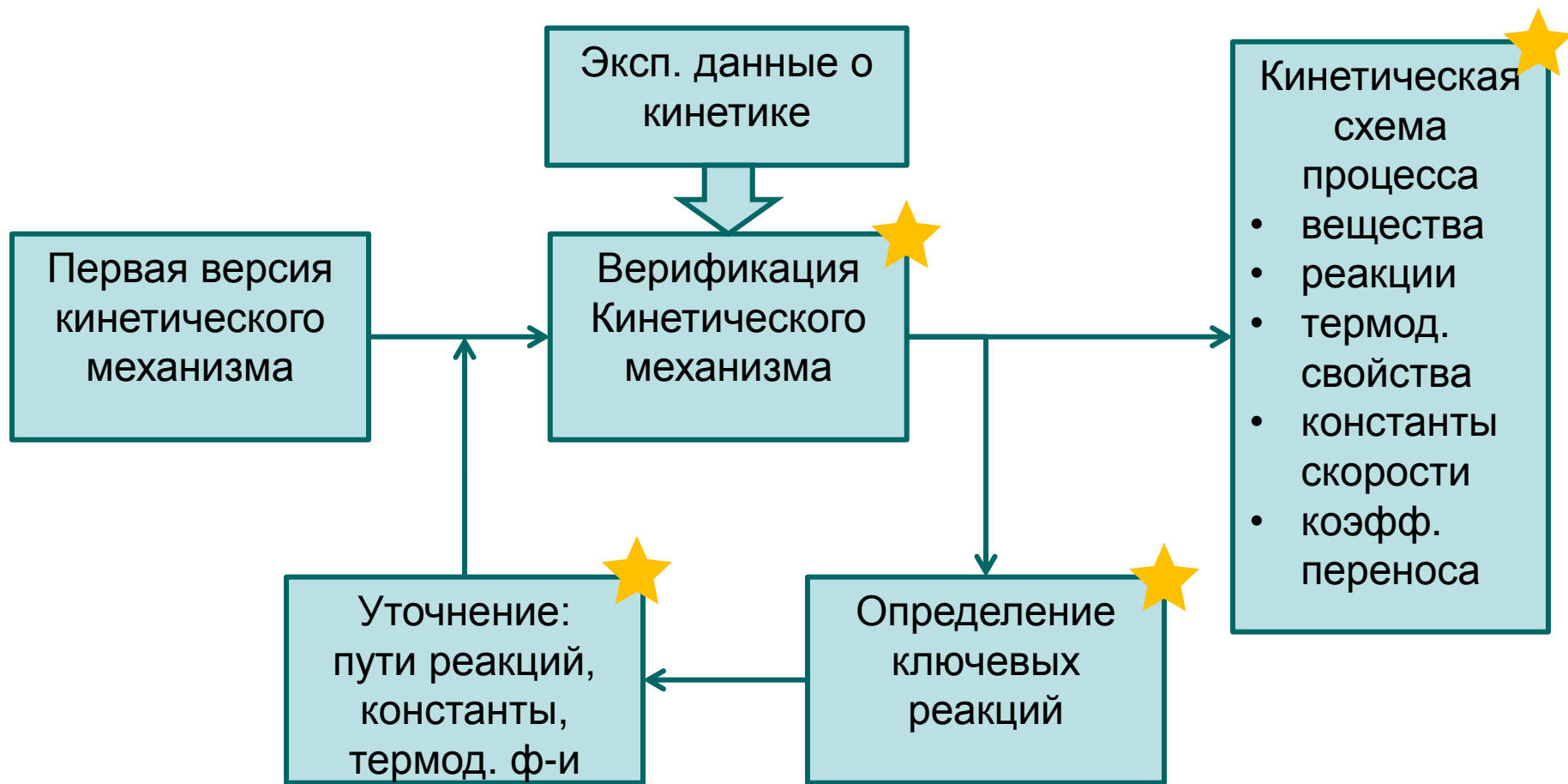
Обзор вебинара

1. Основные этапы разработки химических механизмов процессов в реагирующих средах
2. Сбор, систематизация и анализ исходных данных
3. **Демо:** база данных KitechDB, сравнение кинетических механизмов – вещество/вещество, реакция/реакция
4. Модели для верификации кинетических механизмов на основе экспериментальных данных
5. **Демо:** верификация механизмов горения метана
6. Анализ кинетических механизмов: анализ чувствительности, определение основных путей реакций на основе методов редуцирования
7. **Демо:** редуцирование кинетических механизмов
8. Уточнение термодинамических свойств веществ и констант скоростей химических реакций на основе расчетов из первых принципов
9. **Демо:** расчет константы скорости процесса в программном пакете Khimera

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.

Основные этапы разработки химических механизмов процессов в реагирующих средах



★ Решения «Кинтех Лаб»

Сбор и систематизация исходных данных

Статьи в журналах

- Исследования: Combustion and Flame, Physica Chemistry Chemical Physics, Int. J. Chemical Kinetics, Химическая физика, ...
- Обзоры и сборники верифицированных данных: Vaulch review, ...

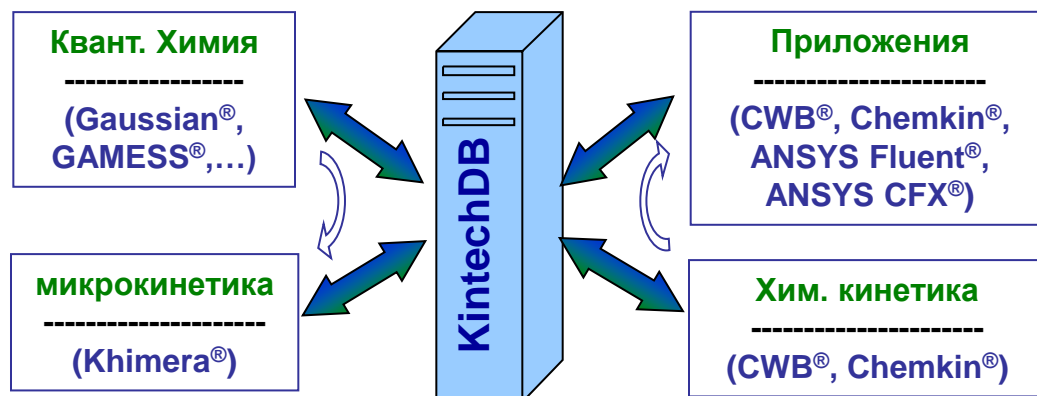
Открытые базы данных в сети интернет, коммерческие базы данных

- NIST, Burkat Millenium database, NASA CEA, ИВТАНТЕРМО

Веб-сайты исследовательских групп, где представлены разработанные кинетические механизмы

- Combustion Chemistry at LLNL web site: combustion chemistry from C1 to C16, bio-fuel, pure and surrogate mixtures https://www-pls.llnl.gov/?url=science_and_technology-chemistry-combustion-mechanisms
- Combustion Chemistry Centre at NUI Galway: combustion chemistry from C1 to C5 <http://c3.nuigalway.ie/mechanisms.html>
- Chemical Reaction Engineering and Chemical Kinetics group at Politecnico di Milano: small and large hydrocarbons, bio-fuels, NOx and PAH <http://creckmodeling.chem.polimi.it/index.php/kinetic-schemes>
- Chemical reaction mechanisms for catalytic systems, developed at Karlsruhe Institute of Technology <http://www.detchem.com/mechanisms.html>
- Master Chemical Mechanism of tropospheric chemistry <http://mcm.leeds.ac.uk/MCM/>

Сбор и систематизация исходных данных



- > 4500 - термодинамика веществ,
- > 800 – молекулярные свойства веществ,
- > 6000 – скорости элементарных процессов,
- > 80 механизмов процессов горения углеводородов, в химически активной плазме
- Инструменты анализа и сравнения, визуализация зависимостей
- Глобальный поиск
- Расширение базы пользователем, импорт механизмов CHEMKIN
- Экспорт механизмов в формат CHEMKIN
- Локальный и удаленный доступ к данным
- Тесная интеграция с другими продуктами компании

Верификация кинетических механизмов механизмов

Приложение

Источник данных
для тестирования
механизмов

Модели
экспериментальных
установок



Процесс	Experimental setup	Theoretical model
Самовоспламенение/трубчатый реактор	<ul style="list-style-type: none"> Ударная труба Машина быстрого сжатия 	<ul style="list-style-type: none"> Calorimetric bomb (batch) reactor  Реактор ид. вытеснения 
Пламя	<ul style="list-style-type: none"> Бунзеновская горелка Горелка плоского пламени 	<ul style="list-style-type: none"> Модель лам. пламени в перемешанной смеси  Диффузионное пламя на встречных потоках
Турбулентное пламя/проточный реактор смешения	<ul style="list-style-type: none"> Реактор на встречных струях 	<ul style="list-style-type: none"> Реактор идеального смешения 

МОДЕЛИ КИНЕТИЧЕСКИХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ...



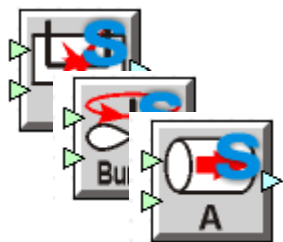
- Ударная труба, Машина быстрого сжатия (CBR),
- Проточный реактор (PFR),
- Реактор на встречных струях (WSR)



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

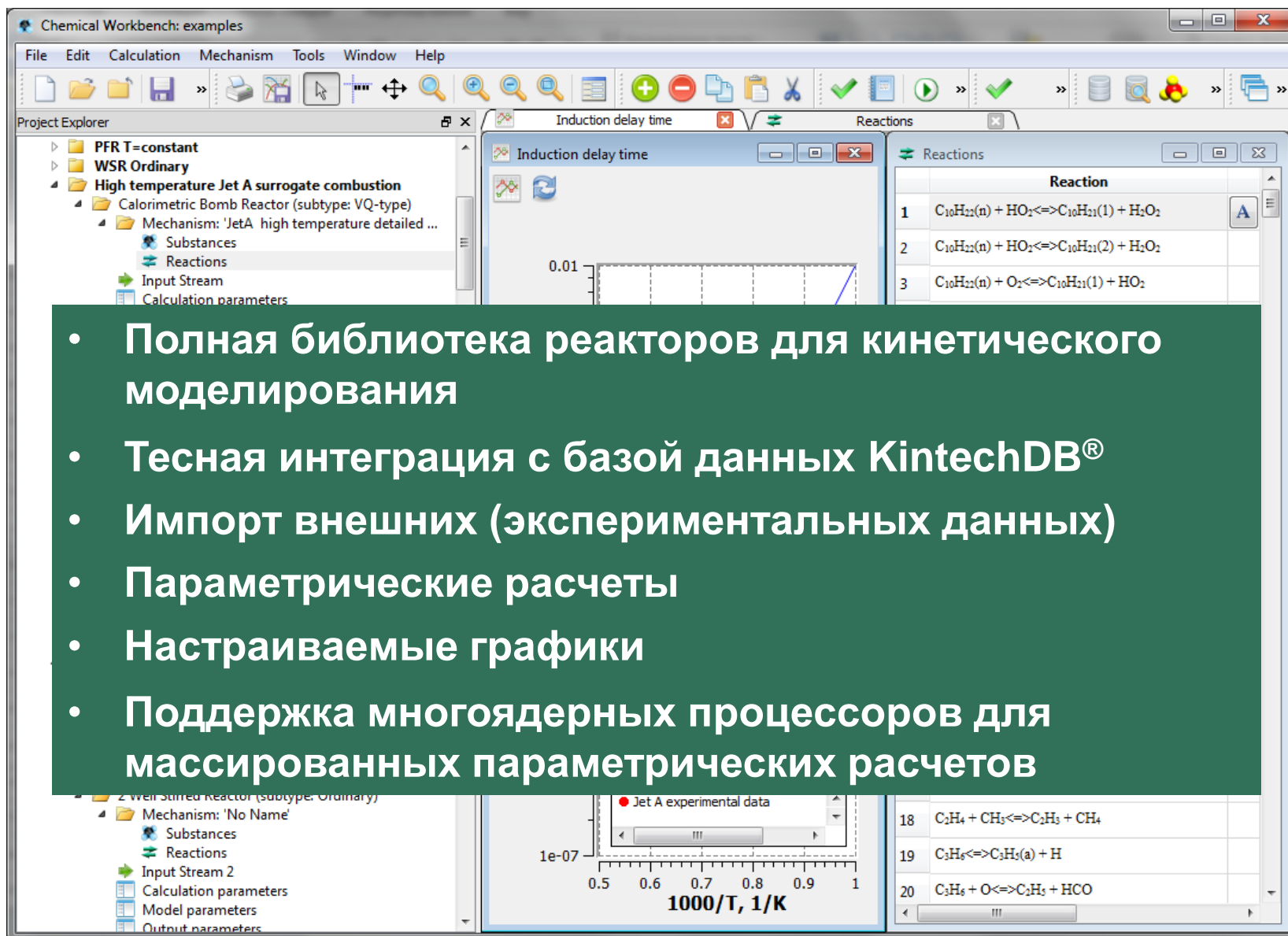


- Неравновесные электрические разряды



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

Верификация кинетических механизмов механизмов



The screenshot displays the Chemical Workbench software interface. The Project Explorer on the left shows a hierarchy of models and mechanisms, including 'High temperature Jet A surrogate combustion' and 'Mechanism: JetA high temperature detailed...'. The main workspace is divided into several panes: 'Induction delay time' showing a plot of induction delay vs. 1000/T, 'Reactions' showing a list of chemical reactions, and a lower plot showing 'Jet A experimental data' vs. 1000/T. The reaction list includes:

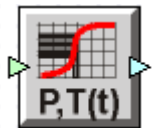
Reaction
1 $C_{10}H_{22}(n) + HO_2 \rightleftharpoons C_{10}H_{21}(1) + H_2O_2$
2 $C_{10}H_{22}(n) + HO_2 \rightleftharpoons C_{10}H_{21}(2) + H_2O_2$
3 $C_{10}H_{22}(n) + O_2 \rightleftharpoons C_{10}H_{21}(1) + HO_2$
18 $C_2H_4 + CH_3 \rightleftharpoons C_2H_3 + CH_4$
19 $C_3H_5 \rightleftharpoons C_3H_5(a) + H$
20 $C_3H_5 + O \rightleftharpoons C_2H_5 + HCO$

- Полная библиотека реакторов для кинетического моделирования
- Тесная интеграция с базой данных KintechDB[®]
- Импорт внешних (экспериментальных данных)
- Параметрические расчеты
- Настраиваемые графики
- Поддержка многоядерных процессоров для массивованных параметрических расчетов

...анализ чувствительности...

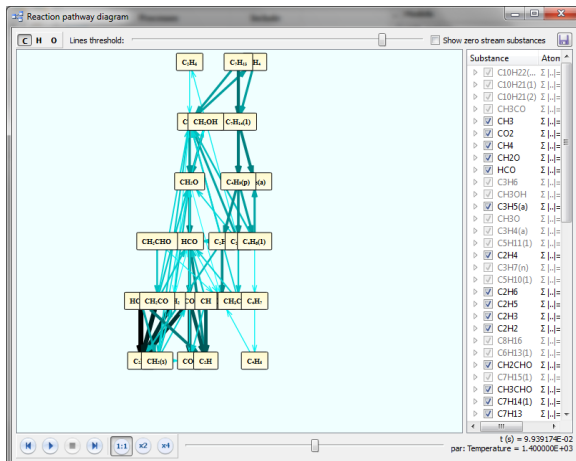


Calorimetric Reactor with Deviation (CRD) – Реактор расчета глобальной чувствительности на основе модели CBR (4 models)



Calorimetric Reactor with Sensitivity (CRS) – Реактор расчета локальной (дифференциальной) чувствительности на основе модели CBR (4 models)

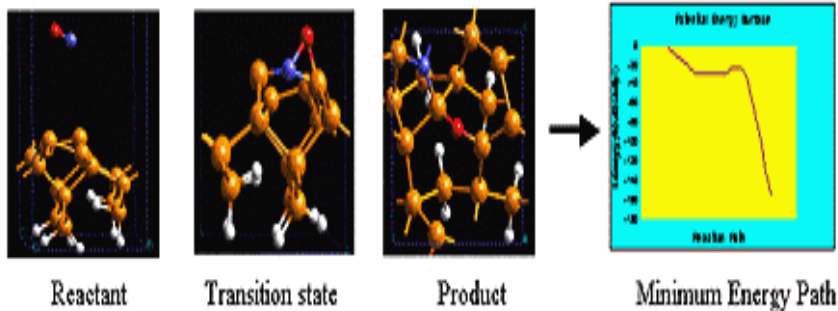
...редуцирование



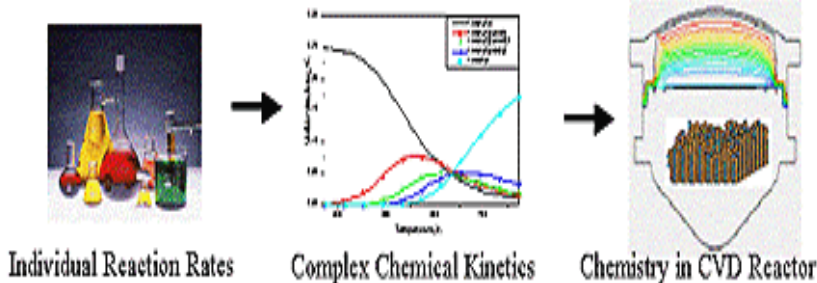
- Диаграмма потоков атомов
- Современные и эффективные методики редуцирования кинетических механизмов: DRG, DRGEP, PCA, CSP, и т.д.

Расчет термодинамических свойств и скоростей элементарных процессов

I. Quantum chemistry



II. Chemical Kinetics



III. Reactor Modeling

ХИМИЯ ТЯЖЕЛЫХ ЧАСТИЦ

- Прямые бимолекулярные реакции
- Бимолекулярные реакции через долгоживущие промежуточные комплексы
- Много-канальные мономолекулярные реакции
- Диссоциация двух-атомных молекул
- Ион-молекулярные реакции
- Поверхностные реакции на границе поверхность-газ

ЭЛЕКТРОННО-МОЛЕКУЛЯРНЫЕ РЕАКЦИИ

- Возбуждение
- Ионизация
- Прилипание

ПЕРЕДАЧА КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ

ФОТОХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ

- Фото-диссоциация
- Тушение
- Изомеризация

МЕТОДЫ КЛАССИЧЕСКИХ ТРАЕКТОРИЙ

ПОВЕРХНОСТНАЯ ДИФфуЗИЯ

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ

Кинтех Лаб: Контакты

Получите демо-версию: evaluation@kintechlab.com

Задайте технические вопросы: support@kintechlab.com

Отдел продаж: sales@kintechlab.com

Вебинар – обратная связь: webinars@kintechlab.com

Наш сайт: www.kintechlab.com

