

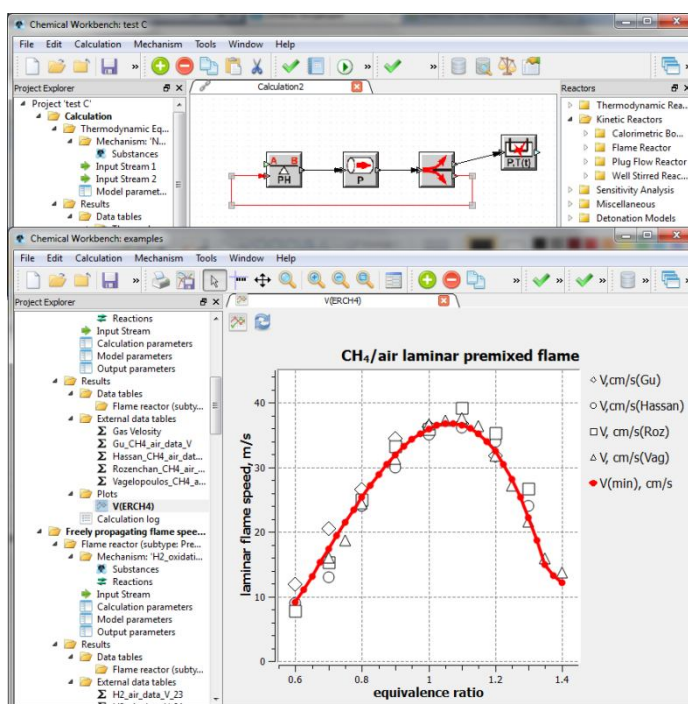
Chemical Workbench®

Интегрированная среда концептуального моделирования физико-химических процессов и разработки кинетических механизмов

Chemical WorkBench® — интегрированный программный комплекс для построения кинетических механизмов и концептуального моделирования физико-химических процессов. Программа незаменима при разработке, моделировании и оптимизации широкого круга технологических процессов, включающих химические превращения. В основу Chemical WorkBench® положены современные научные подходы и модели, интегрированные базы данных физико-химической информации и новейшие вычислительные методы.

Преимущества Chemical Workbench®

- Широкий выбор физико-химических моделей — реакторов — для моделирования многофазного термодинамического равновесия, гомогенной газофазной и гетерогенной кинетики и кинетики неравновесной химически активной плазмы
- Интерактивный рабочий стол для представления физико-химического процесса в виде последовательности реакторов с возможностью образования циклов и автоматической передачей данных между ними
- Широкий набор средств для анализа и работы с кинетическими механизмами: сравнение, анализ, редуцирование
- Широкий выбор аппроксимаций для скоростей химических реакций, в том числе, определяемые пользователем
- Гибкие настраиваемые средства обработки результатов расчётов: задаваемые пользователем шаблоны обработки результатов расчётов и их графического представления
- Автоматические параметрические расчёты, поддержка многоядерных архитектур для ускорения пакетных расчётов
- Встроенная база данных по физическим свойствам атомов и молекул, термодинамической и кинетической информации, механизм химических процессов
- Экспорт / импорт кинетических механизмов в / из формата CHEMKIN®



Chemical Workbench®: физико-химические модели

Богатый выбор моделей для концептуального дизайна физико-химических процессов и анализа кинетических механизмов

- Реакторы термодинамического равновесия
- Кинетические модели химических процессов в проточных реакторах, реакторах идеального смешения и реакторах с замкнутым объёмом
- Реакторы анализа чувствительности кинетических механизмов для реакторов периодического действия и ламинарного пламени предварительно перемешанной смеси
- Реактор ламинарного пламени для расчёта структуры и скорости ламинарного пламени в предварительно перемешанной смеси
- Детонационные и аэродинамические реакторы для расчёта статических и динамических параметров детонационных волн
- Реакторы гетерогенных процессов для расчёта кинетики процессов в среде и поверхностных процессов, таких как напыление, травление, катализ
- Реакторы кинетики неравновесной плазмы
- Реактор мембраны для расчёта характеристик разделения мембранных элементов
- Реактор деления потока

Chemical WorkBench® может быть использован исследователями и инженерами в следующих областях:

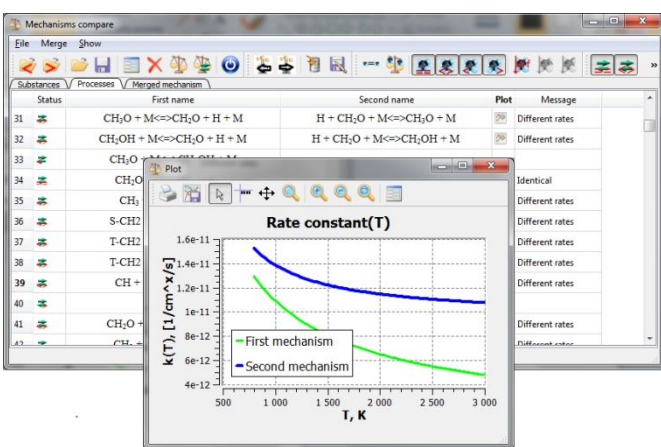
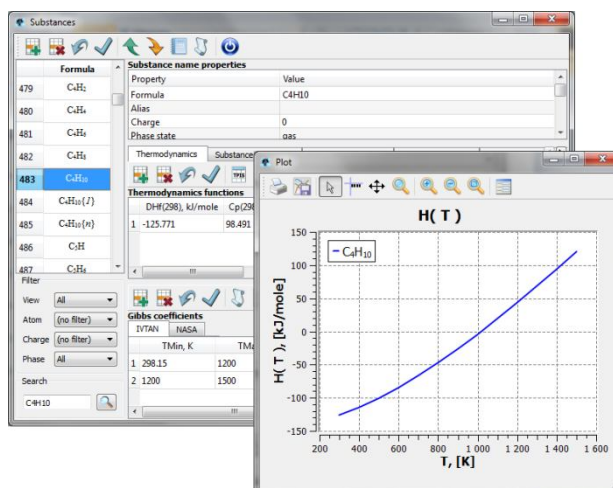
- Общая химическая кинетика и термодинамика
- Разработка кинетических механизмов
- Рост тонких плёнок для микроэлектроники
- Нанотехнология
- Катализ и химическая технология
- Горение, детонация, эмиссия загрязняющих веществ
- Переработка отходов
- Плазменные источники света и плазмохимия
- Высокотемпературная химия
- Образование

Chemical Workbench®: инструмент для анализа и редуцирования кинетических механизмов

Chemical Workbench® содержит широкий набор инструментов для развития кинетических механизмов от детальных до редуцированных моделей

Быстрое построение механизмов со встроенной базой данных

- Термодинамические свойства более чем 4500 индивидуальных веществ
- Физические свойства более чем 1700 атомов и молекул
- Константы скорости для 4500 элементарных реакций в газе и жидкости
- Автоматическое копирование информации из базы данных в проекты Chemical WorkBench®
- Сохранение информации из Chemical WorkBench® в интегрированную базу данных для последующего использования
- Использование базы данных в качестве отдельного приложения для хранения, управления и обмена фундаментальной физико-химической информацией в исследовательских коллективах



Сравнение и объединение механизмов

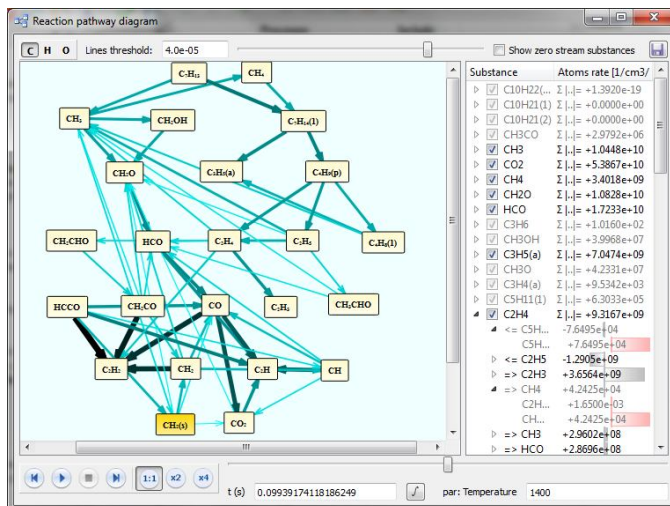
- Определение идентичных веществ и реакций (имя и физические свойства)
- Определение похожих веществ с различными термодинамическими свойствами, реакций с различными константами скорости
- Объединение механизмов после сравнения

Анализ чувствительности для кинетических моделей

- Глобальный анализ чувствительности для реактора периодического действия и модели ламинарного пламени
- Анализ дифференциальной чувствительности и расчёт матрицы чувствительности для реактора периодического действия

Современные методы анализа и автоматического редуцирования кинетических механизмов

- Анализ потоков элементов (Диаграммы путей реакций, Индексы квазистационарности частиц)
- Современные методы редуцирования кинетических механизмов (Анализ скоростей образования веществ, Прямой метод редуцирования, Анализ «принципиальных» компонент, Нормированные коэффициенты чувствительности для веществ и реакций, Анализ направленного графа связности веществ и др.)



Chemical Workbench®: версии

- Chemical Workbench® доступен в нескольких конфигурациях, включающих различные наборы физико-химических моделей. Это даёт гибкость в выборе пакета, удовлетворяющего потребностям проекта и заложенным ресурсам:
 - Базовая версия (термодинамические модели, кинетические модели, модуль редуцирования, стандартная база данных)
 - Пакеты: Горение, Плазма, Химическая технология (+ модели базовой версии)
 - Полная версия
- Chemical Workbench® разработан для платформ Windows PC, Unix-family PC и Mac OS X

Контакты

ООО Кинтех Лаб,
Москва, пл. Курчатова, 1,
123182, Россия

+7 (499) 704-25-81
+7 (499) 704-25-81
info@kintechlab.com
www.kintechlab.com