reaction DESIGN

CHEMKIN

業界標準の高速・高精度化学反応シミュレーション・ソフトウェア

化学シミュレーションは、クリーンでより効率的な設計を可能にします

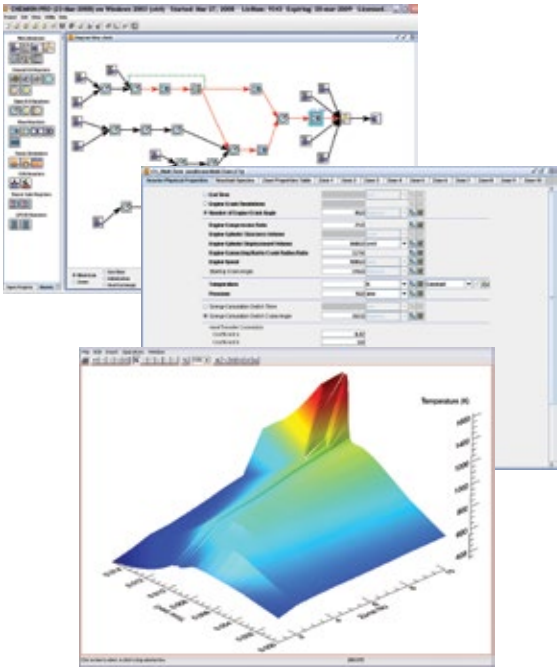
輸送、エネルギー、マテリアル・プロセッシングの分野において、化学反応の影響を理解し予測することは、クリーン・テクノロジ・ソリューションを開発するために不可欠です。ガス・タービン、ボイラー、ピストン・エンジンの設計者は、多様な燃料へ対応しながら排出規制を満たすことに努力し、かつシステム・パフォーマンスの維持、改良を行わなければいけません。同様に、生産性の高い材料や化学プロセスを設計するためには、高い歩留まりと高品質を保ちながら、廃棄物や副産物を最小に抑える必要があります。今日の燃料の多様性、複雑化するエンジン設計、開発期間の短縮を考慮すると、エンジン・パフォーマンスの検証を実機テストに依存することは、コスト高になってしまいます。詳細燃焼化学の効果的シミュレーションを行うことは、汚染物質の排出が少ないシステムを、コスト効率良く設計するために必須です。

CHEMKIN® — 複雑な化学的設計問題を解決するための業界標準シミュレーション・ツールです

CHEMKINソフトウェアは、最も基本的な機能として、複雑な化学反応のシミュレーションを行うことができます。現在利用できる最先端の解析機能によって、高価なハードウェアが製造される前に、設計の潜在的問題をパラメータ探索するための高度な実験計画(Design-For-Experiments)を作成することができます。

CHEMKINは、米国サンディア国立研究所の燃焼コード（Chemkin II）を起源に発展して、ユーザーフレンドリーなインターフェース、クラスで最高のシミュレーション速度、他に類のない精度を持った商業用ソフトウェアとなっています。
CHEMKINは、他のいかなる化学シミュレーション製品よりも広範囲に検証されており、かつ論文審査のある技術専門誌で頻繁に引用されています。

リアクション・デザイン社は、ユーザー・ニーズの違いによって、数種類のCHEMKIN製品を提供しています。CHEMKIN-PROは、特に複雑な反応メカニズムを必要とする大規模化学シミュレーションのために設計されました。CHEMKIN-PROの最先端ソルバーと統合された機能は、特定アプリケーションに対する正確で迅速なモデル開発をサポートします。リアクション・ワークベンチは、燃料工学のエンジニアや研究者向けに、燃料モデルの生成と自動化された反応メカニズム低減機能をCHEMKIN-PROに拡張したものです。CHEMKINは、あまり複雑でないシステム・シミュレーションために、業界をリードしているシミュレーション技術をより安価で提供します。CHEMKIN-CFDは、他社の数値流体力学（CFD）とCHEMKINの機能をリンクすることで、より正確な反応性流体シミュレーションを可能にします。



FEATURE	CHEMKIN	CHEMKIN-PRO	CHEMKIN-PRO Reaction Workbench
Basic Batch / Flow Reactors and Flame Simulators	•	•	•
CVD and Catalysis Reactors	•	•	•
Surface Chemistry	•	•	•
Parameter Study	•	•	•
Solver Speed	BASIC	ENHANCED	ENHANCED
Reaction Path Analyzer		•	•
Particle Tracking		•	•
Multi-Zone Engine Model		•	•
Enhanced Reactor Networking		•	•
Flame Extinction Calculator		•	•
Flame-Speed Table Generator		•	•
Burner Stabilized Stagnation Flame		•	•
LPCVD Furnace Models		•	•
Uncertainty Analysis		•	•
Automated Mechanism Reduction			•
Surrogate Blend Optimization			•
Mechanism Merge / Extraction			•

CHEMKIN-PRO — パワー・ユーザーのための高速、高精度な化学シミュレーション・ツールです。

先進の機能、最新の分析アルゴリズムと手法を取り入れることで、CHEMKIN-PROは最高レベルの速度、精度、ソリューション機能を提供します。

解析時間を大幅に短縮した正確なソリューションを提供します

大規模メカニズムを利用した複雑なモデルのために、CHEMKIN-PROに搭載されたソルバーを大幅に改良しました。それにより、数日から数時間へ、または数時間から数分単位まで、シミュレーション時間を大幅に短縮することが可能となりました。CHEMKIN-PROは、極めて厳しい要求のアプリケーションにおいて、以前のCHEMKINのバージョンより100倍以上も速い結果を出しています。

反応経路の新しい表示機能を提供します

反応経路を可視化するために、CHEMKIN-PROは、リアクション・パス・アナライザ（Reaction Path Analyzer）を提供します。対話的、視覚的な表示を行うことで、リアクション・パス・アナライザはメカニズム開発、削減に役立つ有効な反応経路を表示してくれます。

複雑な流れ場を表現するためにリアクター・ネットワークを提供します。

詳細化学反応によるエミッションを最も効果的に予測するためには、等価リアクタ・ネットワーク（Equivalent Reactor Networks）を利用します。バーナーや反応炉の実機を模擬したシミュレーションをすることができます。

低エミッションの燃焼安定性を、より良く解析できます

消炎モデル（Extinction Model）は、システムの燃焼安定性を決定するための消炎歪み速度(Extinction Strain Rate)を正確に計算します。それは、特に低NOxの予混合燃焼システムで重要となります。

煤とパーティクル生成の理解と予測を行います

CHEMKIN-PROの革新的なパーティクル・トラッキング機能は、パーティクルの生成、成長、凝集、酸化を予測します。パーティクルの平均粒径と数密度の予測をするか、又は煤排出を最適化するために、詳細な粒子径分布予測を行うことも可能です。

高速、高精度でCFD用フレームレット・テーブルを生成します

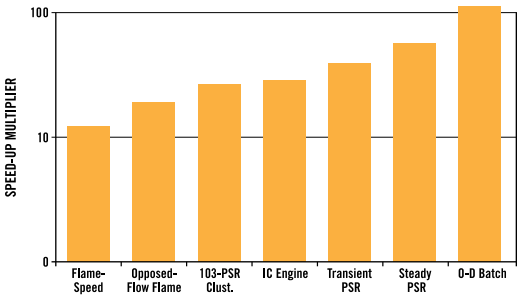
多くの燃焼システム開発者は、CFDシミュレーションにおいて、フレームレット・テーブル・ルックアップを利用した燃焼モデルを使用しています。CHEMKIN-PROは、CFDモデルの入力に必要なフレームレット・テーブルを、高精度かつ高速に生成します。

入力誤差がシミュレーションに与える影響を調べることができます

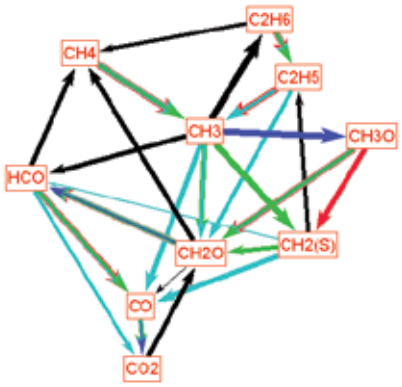
ユーザーが定義した入力精度の誤差範囲の影響を計算する機能 (Uncertainty Analysis) によって、より強力なシミュレーション結果を得ることができます。

ピストン・エンジンのためのマルチゾーン・エンジン・モデルを提供します

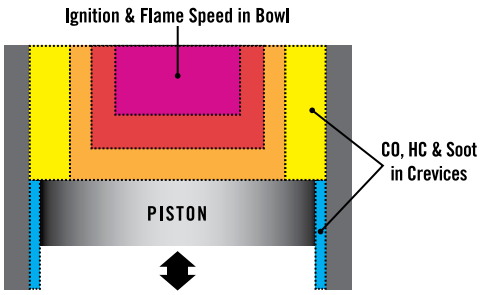
CHEMKIN-PROのマルチゾーン・エンジン・モデルは、HCCIエンジンの点火、NOx、一酸化炭素（CO）、未燃炭化水素（HC）、煤の排出等の重要な燃焼効果の分析を単純化し、かつ最適化してくれます。



Simulation Speed-Up of CHEMKIN-PRO vs. CHEMKIN



Visualize reactions with the Reaction Path Analyzer

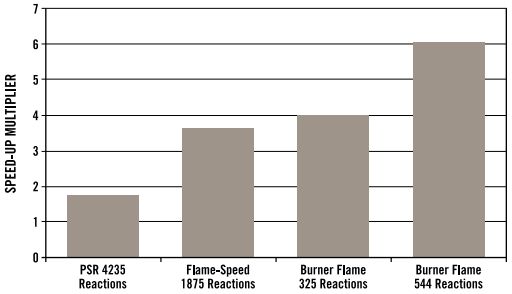


Multi-Zone Engine Model

CHEMKIN

CHEMKIN — 業界をリードするテクノロジを安価で提供します

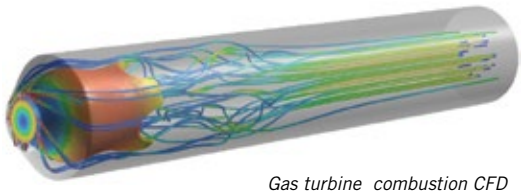
解析速度とCHEMKIN-PROの先進機能を必要とされない設計者のために、リアクション・デザイン社は経済的な選択肢としてCHEMKINを提供します。CHEMKINは、CHEMKIN-IIと比較して6倍程度パフォーマンスが良く、広範囲のアプリケーションで利用されてきた強力で成熟した化学シミュレーション・ツールです。CHEMKINは小規模または削減されたメカニズムを使用する（又は反応の複雑度を重要視しない）シミュレーション・プロジェクトに対して、コスト・パフォーマンスの高いソリューションを 提供します。



Simulation Speed-Up of CHEMKIN vs. Chemkin II

リアクション・ワークベンチ — サロゲート燃料の配合とメカニズム削減の自動化をします

適切な燃料モデルを使用することは、最適な時間内で正確な答えを得るために重要です。リアクション·ワークベンチは、燃料の物理的および化学的特性の両方を一致させながら最適なサロゲート燃料モデルを生成するために、CHEMKIN-PROを拡張したものです。マスター・メカニズムをコンポーネント·メカニズムから自動的に配合したり、又はメカニズム・ユーティリティを使用して、サブ・メカニズムを抽出することができます。メカニズム·リダクションの場合は、リアクション・ワークベンチの自動化されたプロセスに対して、ユーザー・コントロールを可能にします。ユーザーが関心のある特定のシミュレーション·ターゲット（例えば、火炎伝播速度、着火遅れ、NOx、煤、等）および各ターゲットの最大許容誤差を選択します。リアクション·ワークベンチは、それらのシミュレーション目標を満たすために、一連のメカニズム··リダクション手法を自動的に適用します。結果は、実行結果ファイルとオリジナル・メカニズムに対する相対精度が明確になっている最適化されたメカニズムです。



Gas turbine combustion CFD using FLUENT® and CHEMKIN-CFD

CHEMKIN-CFD — CFDソフトウェアとのカップリング機能を提供します

Fluent（米国Ansys, Inc.）等のCFDで、より速くそしてより正確に複雑な化学反応速度論問題を解決するために、リアクション・デザイン社はCHEMKIN-CFDソフトウェア・パッケージを提供することで、詳細な化学反応速度モデリングを可能にしています。アプリケーション・プログラミング・インターフェイス(API)を使用することで、CHEMKIN-CFDは色々な市販及び内製CFDとカップリングすることができます。

リアクション・デザインについて

リアクション・デザインは、適用範囲が広く、かつ使いやすいソフトウェア・シミュレーション・ツール、化学反応モデルとコンサルティング・サービスを提供しています。それによって、輸送機関メーカーとエネルギー関連会社がクリーン・テクノロジーの目標を達成することを支援しています。リアクション・デザインは、気相反応と表面反応のモデリングとシミュレーションの業界標準ソフトウェアの CHEMKIN と CHEMKIN-PRO ソフトウェアの独占的な開発と販売を行っています。 FORTÉ CFDパッケージは、IC エンジンの正確なシミュレーション機能を提供します。 リアクション・デザインは、エミッションと燃焼安定性シミュレーションのためには、CFD 解析結果から反応ネットワークを自動生成する ENERGICO シミュレーション・パッケージも提供しています。リアクション・デザインは、他社のCFD プログラムの解析能力を拡張するためのソフトウェアとしては、CHEMKIN-CFD ソフトウェア・パッケージを提供します。リアクション・デザインの国際的なエンジニア、化学者、プログラマーは、分子レベルからプラント設備までマルチスケール工学にわたっている専門知識を有しております。

リアクション・デザインが、最も複雑な化学的設計問題の解決をどの様に支援できるかについて情報は、info-japan@ansys.com に電子メールをお送り頂くか www.reactiondesign.com で御確認下さい。

Reaction Design Japan

リアクション・デザイン・ ジャパン株式会社

〒160 – 0023 東京都新宿区西新宿6-10-1

日土地西新宿ビル18F

www.reactiondesign.com

電話
03-3342-8880

Fax
03-5324-7308

お問い合わせ
info-japan@ansys.com

技術サポート
support-japan@ansys.com

CBv4

©2015 Reaction Design and CHEMKIN are registered trademarks of Reaction Design.
FORTÉ, ENERGICO, CHEMKIN-PRO, CHEMKIN-PRO Reaction Workbench and CHEMKIN-CFD are trademarks of Reaction Design. All other trademarks are the property of their respective owners.

reaction DESIGN