

## Chemical Workbench® 4.1: новые функции

### Реакторные модели

#### Обновленный высокопроизводительный солвер в моделях одномерных пламен

В CWB 4.1 солвер, используемый в моделях одномерного пламени полностью переработан, чтобы в полной мере отвечать современным требованиям по быстродействию и предельному размеру химических механизмов, которые могут быть использованы в моделях одномерного пламени.

#### Расчет коэффициентов чувствительности в моделях одномерных пламен

В моделях одномерного пламени в предварительно перемешанной смеси реализован расчет коэффициентов чувствительности. Результаты расчетов коэффициентов чувствительности могут быть использованы при разработке химических механизмов, а также для их редуцирования.

#### Рекомбинационные граничные условия в моделях одномерного пламени в предварительно перемешанной смеси

В моделях одномерного пламени в предварительно перемешанной смеси реализованы рекомбинационные граничные условия, позволяющие более точно описывать концентрацию радикалов вблизи поверхности горелки.

### Постпроцессинг и визуализация результатов расчета

#### Колонки со значениями, определяемыми пользователем в таблицах с результатами расчетов

В CWB 4.1 реализована возможность добавления в таблицы, содержащие результаты расчетов, колонки, значения которых рассчитываются по определенным пользователем формулам. Для расчета значения в пользовательских колонках могут быть использованы результаты расчетов, полученные в любой реакторной модели текущего проекта. Значения в пользовательских колонках пересчитываются автоматически при изменении любых результатов расчетов реакторных моделей в проекте и могут быть использованы для построения графиков, совместно с результатами расчета реакторных моделей. Набор пользовательских колонок и формулы для расчета значений в них сохраняются в проекте CWB и могут быть использованы в дальнейшем при необходимости проведения повторных расчетов или изменении параметров моделей.

#### Определяемые пользователем фильтры в таблицах результатов

В CWB 4.1 реализована возможность задания определяемых пользователем фильтров в таблицах результатов. Также реализована возможность сортировки таблицы результатов по заданной пользователем колонке.

#### Обновлённая диаграмма путей реакции

В состав CWB 4.1 включена обновленная диаграмма путей реакции. Диаграмма дополнена диалогом, наглядно отображающим виде диаграммы относительную важность отдельных процессов и путей на диаграмме.

#### Вывод результатов расчет коэффициентов чувствительности

Реализованы новые критерии для определения точки для вывода коэффициентов чувствительности. Это позволяет более точно определить момент вывода результатов расчета чувствительности и существенно сократить объем выводимых результатов.

### Разработка механизмов

#### Модуль сравнения и объединения механизмов

В CWB 4.1 включен модуль для детального сравнения и объединения механизмов. Модуль осуществляет детальное сравнение двух химических механизмов, включая сравнение термодинамических параметров веществ и параметров аппроксимации скоростей химических процессов. Модуль также позволяет получить механизм, объединяющий два сравниваемых механизма.

### Импорт/Экспорт

Выбор единиц измерения при экспорте химических механизмов в формат Chemkin.

#### Контакты

ООО Кинтех Лаб  
Пл. Академика Курчатова  
д. 1, Москва, 123182

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