

ТРАЕКТОРНЫЕ РАСЧЕТЫ ДЛЯ ВЕРИФИКАЦИИ МОДЕЛЕЙ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ
В ТЕРМИЧЕСКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ УСЛОВИЯХ*М.Ю. Погосбемян, А.Л. Сергиевская*

НИИ механики МГУ им. М.В.Ломоносова

В работе рассматриваются результаты верификации теоретических моделей диссоциации и обменных химических реакций на примере диссоциации $O_2+O \rightarrow 3O$, $N_2+O \rightarrow 2N+O$, и обменных химических реакций $N_2+O \rightarrow NO+N$ и $CO+N \rightarrow CN+O$, выполненной на основе траекторных расчетов.

Для моделирования динамики молекулярных реакций использовался вычислительный комплекс "MD Trajectory", разработанный ранее авторами доклада. Программный код распараллелен с использованием технологии MPI (message passing interface) и ориентирован на использование возможностей современных высокопроизводительных кластерных систем, для чего. В расчетах использовались поверхности потенциальной энергии, полученные методами квантовой механики. Вероятности переходов с одного колебательного уровня на другой были свернуты в уровневые и двухтемпературные константы скорости в предположении распределений Больцмана по внутренним степеням свободы и Максвелла по поступательным.

Вычислительные эксперименты проводились в среде Интернет-Каталога моделей физико-химических процессов упругих столкновений, энергообмена и химических реакций в различных приближениях. Каталог - специально разработанная коллекция моделей процессов с возможностью проведения вычислений с любой моделью в широком диапазоне значений аргументов, позволяющая модифицировать параметры моделей.

Сравнительное моделирование характеристик физико-химических процессов (двухтемпературных и уровневых констант скорости химических реакций и других характерных параметров моделей) производится для определения степени достоверности результатов, полученных при использовании теоретических моделей, и для последующего принятия решения об их рекомендуемости для более эффективного применения наиболее адекватных моделей в прикладных задачах.

В докладе будут представлены:

1. Сравнение расчетов уровневого фактора для диссоциации кислорода и азота, полученных методом МКТ и по моделям Мэрроуна-Тринора, γ -модели Лосева.
2. Сравнение расчетов фактора неравновесности диссоциации кислорода и азота, полученных методом МКТ и по двухтемпературным моделям Мэрроуна-Тринора, Кузнецова, Мачерета-Фридмана и Смехова.
3. Сравнение расчетов уровневого фактора для обменных реакций $N_2+O \rightarrow NO+N$ и $CO+N \rightarrow CN+O$, полученных методом МКТ и по моделям CVCV, ТИП и α -модели.
4. Сравнение расчетов фактора неравновесности для обменных реакций $N_2+O \rightarrow NO+N$ и $CO+N \rightarrow CN+O$, полученных методом МКТ и по моделям Park, Мачерета и α -модели.