

РАЗРАБОТКА МЕТОДА КВАНТОВОЙ СОБЫТИЙНО-ОПРЕДЕЛЕННОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ.

А.С. Ветчинкин^{1,2}

¹ НИИ механики МГУ, Москва;

² ИХФ РАН, Москва

Одной из важнейших актуальных задач является создание многоуровневых моделей и соответствующих алгоритмов реализации вычислений на компьютерах экзафлопного класса для исследования неравновесных физико-химических процессов в энергетических установках. Такой многоуровневый подход предполагает серию исследований как физики элементарного акта реакции, так и моделирования горения топлива, в том числе пористого (угольный кокс). Для моделирования этих процессов исследована связь скоростей элементарных стадий, которые определяются квантово-механическими данными интермедиатов, и макроскопическими параметрами в задачах течения многофазных сред с химическими и физическими превращениями при отсутствии термодинамического равновесия. В таких неравновесных процессах описание химических превращений через статистически усредненные константы скоростей реакций представляется недостоверным и необходимо детальное рассмотрение динамики столкновений с детальным квантово-механическим определением скоростей элементарных стадий для неравновесной среды. С этой целью нами разработан новый метод событийно-определенной молекулярной динамики расчета столкновений со стохастической итерацией. Этот метод не только позволит вычислить кинетические параметры в условиях, недостижимых для лабораторного эксперимента или для экспериментально не наблюдаемых элементарных стадий, но и учесть отклонения локальных макроскопических условий от равновесия, описываемого распределением Максвелла-Больцмана. В качестве примера было проведено численное моделирование окисления (горения) стенок пор угольного кокса.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 13-01-12091 офи_м).