

ИНДЕКС УДК 531

ТРИНИТАРНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ПРОЦЕССОВ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

С.А.Лосев

НИИМеханики МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва
losev@imec.msu.ru

Аннотация

Краткое описание основных процессов физико-химической кинетики в газовой динамике и их моделирование представлено в тринитарной форме – на основе триадного подхода к классификации этих процессов.

TRINITAR PRESENTATION OF PROCESSES IN PHYSICAL AND CHEMICAL KINETICS

The brief description of basic processes in physical and chemical kinetics at gasdynamics and their simulation are presented in trinitar form on the base of triad approaches to classification of these processes.

Ключевые слова: физико-химическая кинетика, газовая динамика, моделирование процессов, тринитарное представление, триадный подход

Структурированное информационное описание знаний, событий и отношений между ними наиболее удобно представлять в *тринитарной* форме на основе триадного подхода к построению соответствующих объектов с применением систем классифицирования. Применение тринитарного подхода позволяет решать проблемы применения, активного расширения и развития формализации научных знаний.

Системные триады с большим разнообразием, всесторонним подходом и применением построены Рэмом Георгиевичем Баранцевым во многих его монографиях (более пятнадцати томов!), в частности – в книге «Становление тринитарного мышления» [1]. Пример одной из начальных триад: <рацио-эмоцио-интуицио>, другой пример триады описания общего подхода: <форма-содержание-применение>.

Тринитарное представление физико-химической кинетики и ее моделей при описании газа демонстрирует различные направления работ в этой области. Это представление включает множество приведенных ниже конкретных триад.

Реализация содержания этих триад по физико-химической кинетике возможна при использовании информации в справочниках, например – в [2,3] и других публикациях, прежде всего – в энциклопедических изданиях по физике и химии – см. [4-8].

Триада основных физических объектов

- частицы (атомы, молекулы, ионы, электроны)
- процессы (результат взаимодействия частиц)
- среда (совокупность множества частиц и протекающих процессов)

Уровни описания среды (см. [3], стр.14,15)

- микроскопический (молекулярный)

- кинетический
- макроскопический (феноменологический)

Состояние газа с учетом числа Кнудсена Kn

$Kn = l/L$, l – длина свободного пробега частиц между столкновениями, L – характерный линейный размер в газодинамической задаче.

- разреженный газ $Kn \geq 1$, $l \geq L$,
- переходная область $Kn < 1$, $l < L$,
- сплошная среда $Kn \ll 1$, $l \ll L$.

Триада

Физика – математика – информатика

Триада представления моделей

физическая модель формируется в виде образов, представлений и допущений при описании частиц, процессов и среды.

математическая модель включает набор переменных для описания исследуемых объектов: формулы, соотношения и уравнения, связывающие эти переменные и входящие в них параметры и коэффициенты.

информационная модель дает структурированное представление элементов информации и связей между ними, реализующее физическую и математическую модели

Физическая модель

- образы
- представления
- допущения

Математическая модель

- переменные
- уравнения
- коэффициенты

Информационная модель включает:

- накопление информации
- обработка информации
- манипуляция информацией

Процессы физико-химической кинетики

- колебательная релаксация
- химическая кинетика
- кинетика плазмы

Процессы

- элементарный – взаимодействие двух или трех частиц
- простой – множество одинаковых элементарных процессов
- сложный – совокупность разнообразных простых процессов

Триада

Наблюдаемое явление – физическая модель – математическая модель

Триада

- информация об исходных результатах экспериментов и пробных расчетах
- результаты первой обработки исходных данных

- логико-математическая обработка данных с установленной категорией достоверности

Триада

База данных – База моделей – База знаний

База данных

- комплекс данных
- методы обработки данных
- методы применения данных

База моделей физико-химической кинетики

- перечень моделей, описывающих частицы, процессы и среду (ч-п-с)
- набор данных для обеспечения реализации моделей
- комплекс алгоритмов и формул для вычисления величин (ч-п-с) в различных приближениях

База знаний в области физико-химической кинетики

- система результатов сбора информации о знаниях
- комплекс систематизированной эмпирической и теоретической информации о знаниях
- система выдачи информации о знаниях

Физико-химические модели являются:

- интуитивными (эвристическими) на основе неформальных знаний – как обобщение представлений о сути процесса
- эмпирическими - на основе общетеоретических представлений и соотношений по результатам экспериментов и оценочных расчетов
- аналитическими – на основе фундаментальных теоретических принципов

Выбор моделей по их специфике

- простота – применение в модели наиболее простых соотношений и формул
- универсальность – возможность использования модели в широком диапазоне применения
- достоверность (точность) – степень соответствия модели реальным данным

Приближения в описании моделей

- однотемпературное – термически равновесное однотемпературное состояние газа при единой температуре всех компонентов (при пренебрежимо малых отклонениях от равновесия между различными степенями свободы молекул)
- многотемпературное – термически неравновесное многотемпературное состояние газа в отсутствие равновесия между поступательными и колебательными степенями свободы молекул-реагентов, но с сохранением больцмановского распределения (двух- и многотемпературный газ, модовая кинетика)
- уровневое – термически неравновесное состояние газа в отсутствие больцмановского распределения с описанием заселенностей отдельных колебательных уровней (уровневая кинетика)

Приближения в описании уровней кинетики

- исходная – регистрируются состояния только реагентов
- результирующая – регистрируются состояния продуктов реакции
- полная – регистрируются состояния как реагентов, так и продуктов реакции

Характерные времена процессов колебательной релаксации τ_V , химических и плазмохимических реакций τ_C и термически неравновесной кинетики τ_{CV}

- отсутствие необходимости учета протекания химических реакций ($\tau_C \gg \tau_V$)
- химические реакции при равновесном состоянии по колебательным уровням молекул
- термически неравновесные химические реакции $\tau_C \sim \tau_V$ (τ_{CV})

Моделирование динамики столкновений частиц

- Квантовомеханическая динамика
- Полуклассическое приближение
- Метод классических траекторий (МКТ)

Архитектура информационно-вычислительного комплекса

- Уровень представления (пользовательский интерфейс)
- Уровень вычислений (алгоритмический фонд)
- Уровень хранения (информационный фонд)

Библиотека вычислительных модулей

- Алгоритмическое описание
- Компьютерная реализация моделей
- Пользовательский интерфейс

Литература

1. Баранцев Р.Г. Становление тринитарного мышления. РХД: Москва, Ижевск, 2005, 124 с.
2. Физико-химические процессы в газовой динамике. Под ред. Г.Г. Черного и С.А. Лосева. Том первый. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме. М.: Научный мир, 2007. 399 с.
3. Физико-химические процессы в газовой динамике. Под ред. Г.Г. Черного и С.А. Лосева. Том второй. Физико-химическая кинетика и термодинамика. М.: Научн. изд. центр механики, 2002. 368 с.
4. Физическая энциклопедия. Под ред. А.М. Прохорова. В пяти томах. М.: Сов. – Б. Рос. Энциклопедия. 1988–1994
5. Химическая энциклопедия. Под ред. И.Л. Кнунянца, Н.С. Зефирова. В пяти томах. М.: Сов. – Б. Рос. Энциклопедия. 1988–1998
6. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Под ред. В.Е. Фортова. М.: Наука. 2000
7. Физический энциклопедический словарь. Под ред. А.М. Прохорова. М.: Б. Рос. Энциклопедия. 1995
8. Физические величины. Справочник. Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат. 1991