

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



# СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

**№ 2019666436**

**«Метод расчета равновесного химического состава и термодинамических параметров плотных газов»**

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук (ИГиЛ СО РАН) (RU)*

Автор: *Прууэл Эдуард Рейнович (RU)*

Заявка № **2019664988**

Дата поступления **22 ноября 2019 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ **10 декабря 2019 г.**

*Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности*

*Г.П. Ивлиев*





ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА  
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ  
ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Номер регистрации (свидетельства):  
2019666436

Дата регистрации: 10.12.2019

Номер и дата поступления заявки:  
2019664988 22.11.2019

Дата публикации и номер бюллетеня:  
10.12.2019 Бюл. № 12

Контактные реквизиты:  
нет

Автор(ы):

Прууэл Эдуард Рейнович (RU)

Правообладатель(и):

Федеральное государственное бюджетное  
учреждение науки Институт гидродинамики  
им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения  
Российской академии наук (ИГиЛ СО РАН)  
(RU)

Название программы для ЭВМ:

«Метод расчета равновесного химического состава и термодинамических параметров плотных газов»

Реферат:

Программный комплекс позволяет проводить расчеты равновесных термодинамических параметров плотных газов и флюидов с учетом межмолекулярных взаимодействий в области параметров по температуре от 100 до 10 000 К и до давлений 100 ГПа. При заданной температуре и плотности вычисляется равновесный химический состав, внутренняя энергия, теплоемкости, показатель адиабаты и скорость звука в исследуемой смеси. В расчетах учтена возможность образования следующих химических компонент: Ar, Ne, He, Kr, N<sub>2</sub>, N, O<sub>2</sub>, O, H<sub>2</sub>, H, H<sub>2</sub>O, OH, NH<sub>3</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub>, NO. Для построения уравнения состояния используются методы молекулярной динамики и статистической физики. При этом вещество рассматривается как набор точечных объектов (молекул), взаимодействующих с центральным парным потенциалом в форме ехрб. Дополнительно молекулы обладают внутренними степенями свободы, энергия которых зависит только от температуры. Для определения давления и полной энергии системы численно решается задача движения небольшого ансамбля частиц (NVT ансамбль из 100-200 молекул), при этом внутренняя энергия системы вычисляется как суммы кинетических энергий молекул и потенциальной энергии взаимодействия, давление вычисляется по Теореме о вириале. Программный комплекс реализован в виде библиотеки и набора утилит с доступом по веб интерфейсу [http://ancient.hydro.nsc.ru/chem/dense\\_index.html](http://ancient.hydro.nsc.ru/chem/dense_index.html). Полученные результаты представляются в виде таблиц и гистограмм.

Язык программирования: C++, PHP

Объем программы для ЭВМ: 2 Мб