

ReaxGen 1.0 反应机理自动生成程序使用文档

ReaxGen 1.0 程序可以实现烷烃分子裂解燃烧反应机理的自动生成。目前 ReaxGen 程序包含高温裂解和燃烧反应类型 19 种，低温燃烧反应类型 23 种。根据反应类的思想给出每种反应类型的动力学参数，采用基团贡献法实现物种热力学参数和输运参数的计算。ReaxGen 程序的基团贡献法部分包含 204 个分子基团，110 个自由基基团，89 个环校正基团的热力学参数值，实现了对这些基团的准确识别，可以计算大多数含 C、H、O、N 元素物种的热力学数据。含有 22 个基团的临界参数数据，可以实现大多数含 C、H、O 元素物种输运数据的计算。

reaxgen-dist.tgz 是 ReaxGen 程序的发布版本，下面给出了程序的使用。

§ 1 安装

将 `reaxgen-dist.tgz` 文件解压：

```
tar xzf reaxgen-dist.tgz
```

进入 `reaxgen-dist` 目录，在这个目录下：

`reaxgen` 可执行程序是主程序

`lib` 目录含有 `reaxgen` 主程序运行时需要的动态库：`libreaxgen.so` 和 `smiles.so`

`reacbase` 文件夹含有反应基础库，即小分子反应核心机理

`test.inp` 文件是程序运行输入文件，供用户参考

`gafile` 是只进行热力学输运参数计算时的输入文件

这样用户准备好输入文件以后（类似于 `test.inp` 或者 `gafile`），就可以通过以下命令调用 `reaxgen` 程序：

```
./reaxgen inputfile
```

如果您在使用过程中遇到问题，请将信息发送至 `xyli@scu.edu.cn`、`wangjingbo@scu.edu.cn` 邮箱，我们会及时处理，感谢您的使用与建议。

§ 2 命令行选项

ReaxGen 程序易于使用，有良好的用户接口，可实现混合燃料组分的处理。运行以下命令打印程序的帮助信息：

```
./reaxgen -h
```

帮助信息包含 4 个部分：

命令行选项

输入文件格式

使用用户定义的反应基础库

直接进行物种的热力学/输运数据计算

命令行选项有：

`-h` 得到程序的简要使用说明

`-i` 指定输入文件名，生成反应机理。`-i` 选项可省略，但输入文件必须指定。

- s 指定输出物种文件名。此选项可省略，此时默认输出文件为 species.dat。
- r 指定产生的反应机理的文件名。此选项可省略，此时默认输出文件为 reactions.dat
- c 指定用户自定义反应基础库文件名。
- n 指定用户自定义反应基础库中物种的 SMILES 标识文件。与-c 选项同时使用。
- g 指定直接进行物种热力学/输运数据计算是物种文件名。

§ 3 输入文件格式

ReaxGen 输入文件由 3 个模块（或者称为组）构成，分别是 \$simulationtype(\$stype), \$reactant(\$react), \$control(\$control)。括号内为简写。输入字符大小写无关，以#或者! 开头的行为注释行。

\$stype 模块中指定机理生成的温度范围和模拟类型。关键字 high 和 low 指定生成高温还是低温机理。关键字 pyrolysis 和 oxidation 指定进行裂解机理生成还是燃烧机理生成。

\$react 模块使用 SMILES 表示指定烷烃反应物分子，可以指定多个反应物分子，实现混合组分的机理生成。按照 SMILES 规则，可以表示多环分子，自由基，芳香性分子，配合物；还可以对顺反异构和光学异构进行标识，功能强大。通过 SMILES 规则得到的字符串表示，适合于快速的计算机处理，节省计算时间和存储空间。基于以上优点，SMILES 规则应用广泛，日益成为分子一维表示的标准语言。关于 SMILES 规则的详细说明，可以参考 DAYLIGHT 公司的网站(www.daylight.com/dayhtml/doc/theory/index.html)。

\$control 模块中可以指定一些控制选项，这些选项会影响反应机理的生成并改变文件的输出。每个控制选项都是一个 bool 变量，非 true 即 false，在以下说明中，括号中是变量的默认值，如果添加这个选项，则改变其默认值。

ahaf (= false): 是否需要烯烃 delta 位及更远位置处发生 H 提取反应。

ahag (= false): 是否需要烯烃 gamma 位发生 H 提取反应。

diene (= false): 是否允许生成的双烯物种进行反应，默认值否。对双烯采用 dalup 选项进行集总处理更好。

dalup (= true): 双烯集总反应。

drad (= true): 是否允许环烷烃分子反应生成双自由基物种。

hviny (= false): 是否允许烯烃，二烯烃烯基位氢提取。

absvr (= false): 是否允许烯基 beta 断裂生成烯基自由基。

dasvr (= false): 是否允许二烯 beta 断裂生成烯基自由基。

aah (= false): 是否允许 H 原子加成到烯烃双键。

aaho2 (= false): 是否允许 HO2 自由基加成到烯烃双键。

daoh (= true): 是否禁止 O、OH 自由基加成到烯烃双键。默认值 true，允许反应发生。

dhakr (= true): 是否允许高温燃烧反应产生的醛和酮进一步反应。默认值 true，允许反

应发生。

`echbi (= false)`: 初始反应允许 C-H 键断裂反应发生。默认值 `false`, 不允许反应发生。

`echbl (= false)`: 低温反应允许 C-H 键断裂反应作为初始反应。默认值 `false`, 不允许反应发生。

`rrev (= false)`: 是否将 C-C 键断裂生成双自由基的反应写为可逆反应。

`rexp (= false)`: 是否显示写出可逆反应, 便于数据库动力学数据搜索。

`mfile (= false)`: 针对每个反应类型生成机理的输出文件, 便于在后续搜索动力学数据库时按照反应类型进行统计。默认值否。

`ltnht (= false)`: 对于低温反应, 是否禁止除 `beta` 断裂反应以外的几乎所有高温反应类型。

`ltrooh (= false)`: 对于低温反应, 是否禁止 `RO2` 自由基氢提取生成 `ROOH`。

`ltnhpa (= false)`: 对于低温反应, 是否禁止 `hydroperoxyalkene` 物种生成。

`ltikpd (= false)`: 对于低温反应, 是否禁止中间层次的 `ketohydroperoxide` 物种生成。

`ltnaoa (= false)`: 对于低温反应, 是否禁止烷基氧化生成烯烃。

这 3 个模块在输入文件中的出现没有次序限制, 并且可以多次出现。模块名中的 `$` 符号必须出现在第 1 列。如果这个模块的内容可以在一行写完, 就没有必要使用 `$end` 关键字结束这个组的输入。但是如果这个组的内容占据多行, 就必须以 `$end` 关键字结束输入。输入文件的例子如下, 以 `$` 开头的为第 1 列:

```
#输入文件格式
$stype high                #$stype 组出现 2 次, 不需要 $end 结束输入。
$stype oxidation           ! 产生高温燃烧机理
#燃料分子为正庚烷和甲基环己烷, 需要 $end 结尾。
$react
CCCCCCC
CC1CCCCC1
$end
$ctrl $end
```

§ 4 调用

写好输入文件 `input` 后, `ReaxGen` 程序最简单的调用命令是:

```
./reaxgen input
```

程序运行产生物种文件 `species.dat`, 反应文件 `reactions.dat`, 热力学文件 `therm.lst`, 和输运数据文件 `trans.dat`。程序还会产生 `check` 文件, 比如 `check3758.dat` 文件, 其中 3758 程序运行的进程 id。通过 `check` 文件可以详细了解反应机理产生过程。

如果用户想将产生的物种文件命名为 `sout`, 产生的机理文件命名为 `rout`。调用程序的命

令如下所示:

```
./reaxgen -i input -s sout -r rout
```

或者简化为:

```
./reaxgen input -s sout -r rout
```

ReaxGen 程序提供 C0-C2 反应基础库, 并允许用户提供自己的反应基础库。程序提供的默认的反应基础库主要是在 Exgas 反应基础库的基础上修改得到的。对于裂解反应有 30 个物种, 84 个反应, 参见 reacbase 目录下的 C02PyroMech.inp 和 C02PyroThermo.dat 文件。对于燃烧反应有 69 个物种, 451 个反应, 参见 reacbase 目录下的 C02CombustMech.inp 和 C02CombustThermo.dat 文件。如果自动生成的物种出现在反应基础库中, 该物种采用反应基础库中的名字。自动生成的机理和反应基础库中的机理不会重复。假如用户想使用自己的反应基础库, 例如使用 Wang 等人的反应基础库, 参见 reacbase 目录下的 WangHaiCombustMech.inp 和 WangHaiCombustThermo.dat 文件。调用命令如下:

```
./reaxgen input -c WangHaiCombustMech.inp -n WangHaiSpeSmi.inp
```

其中 *WangHaiCombustMech.inp* 是用户自定义的反应基础库文件名, 格式与 Chemkin 反应机理格式相同。*WangHaiSpeSmi.inp* 是用户自定义反应基础库中物种的 SMILES 表示文件。反应基础库中的物种一定要全部列在这个文件中, 但不一定全部都给出相应的 SMILES 表示。如果你认为这个物种一定不会在自动生成机理中出现, 那么就可以不给出这个物种的 SMILES 表示。如果这种假设是正确的话, 那么自动生成的机理和用户反应基础库中的机理不会重复, 物种名字相一致。

ReaxGen 程序可以直接进行物种热力学/输运数据的计算, 而不生成反应机理, 这样方便进行物种热力学/输入数据的比较。输入文件参见 *gafile* 文件。调用命令如下:

```
./reaxgen -g gafile
```

ReaxGen 可以大多数 C、H、O、N 物种的热力学数据和大多数 C、H、O 物种的输运数据。如果由于基团贡献值的缺乏, 不能计算相关数据, 则把物种输出到 *noGA* 文件, 列出这些物种。