

Химические реакции, стохастическое горение

Этап 3.Комплексы программ

Озьяс Стив Икнэль Дани

Содержание

1	Цель работы	3
2	Задачи	4
3	Решение	5
4	Код программы на языке Julia	8
5	Выводы	11
6	Список литературы	12

1 Цель работы

Написать программный комплекс для реализации задачи.

2 Задачи

1. Напишите программу, моделирующую ансамбль частиц, в которых возможна мономолекулярная экзотермическая реакция. Рассмотрите случай нулевой теплопроводности. Постройте графики зависимости числа непрореагировавших частиц от времени при разных температурах. Сравните полученные графики с теоретическими зависимостями.
2. Постройте графики зависимости числа непрореагировавших частиц, температуры и скорости реакции от времени в случае бесконечной теплопроводности внутри области моделирования, считая процесс адиабатическим.

3 Решение

Построили графики зависимости числа непрореагировавших частиц, температуры и скорости реакции от времени в случаях нулевой теплопроводности и бесконечной теплопроводности внутри области моделирования, считая процесс адиабатическим.

- Случай нулевой теплопроводности

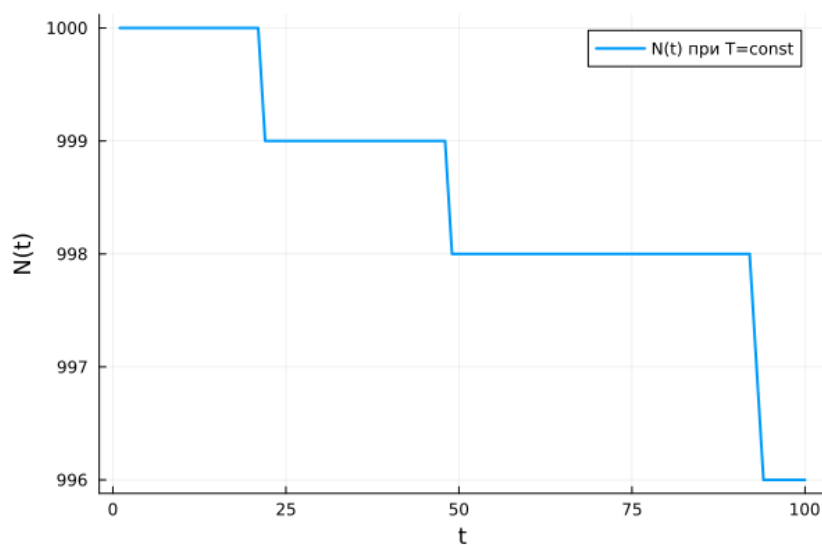


Рис. 3.1: График зависимости числа непрореагировавших частиц от времени

- Случай бесконечной теплопроводности

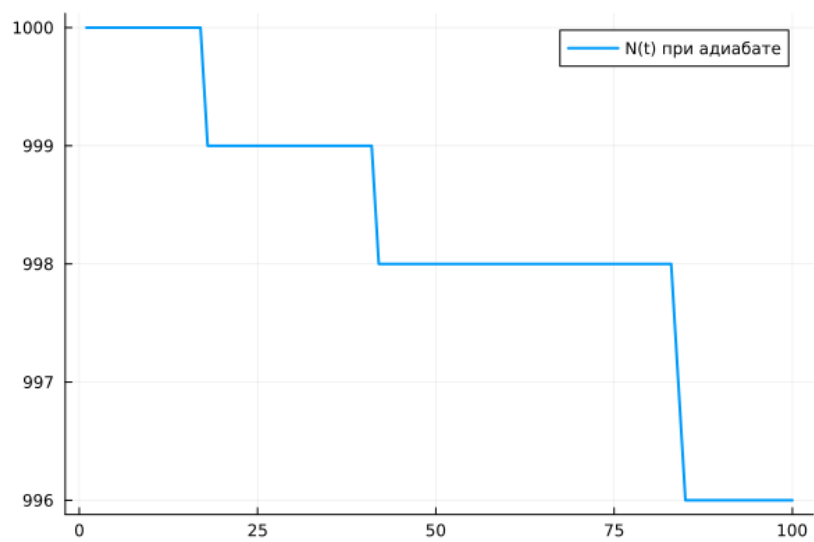


Рис. 3.2: График зависимости числа непрореагировавших частиц от времени

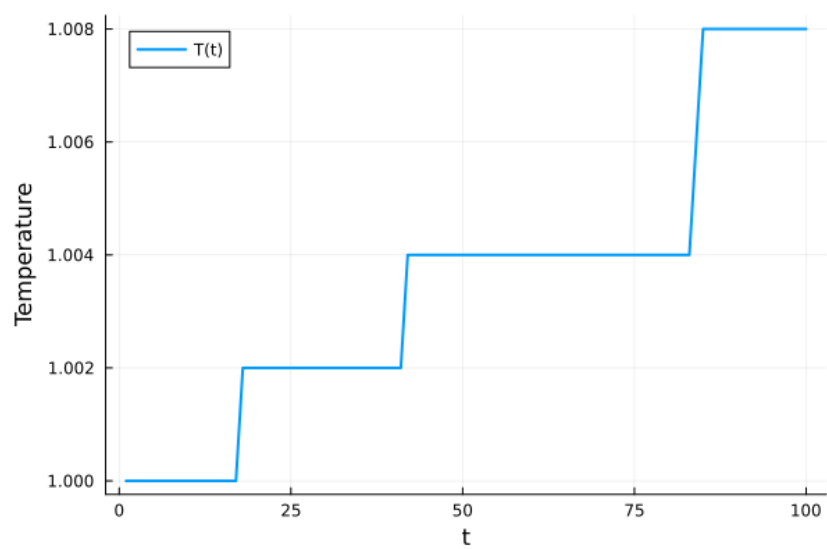


Рис. 3.3: График зависимости температуры от времени

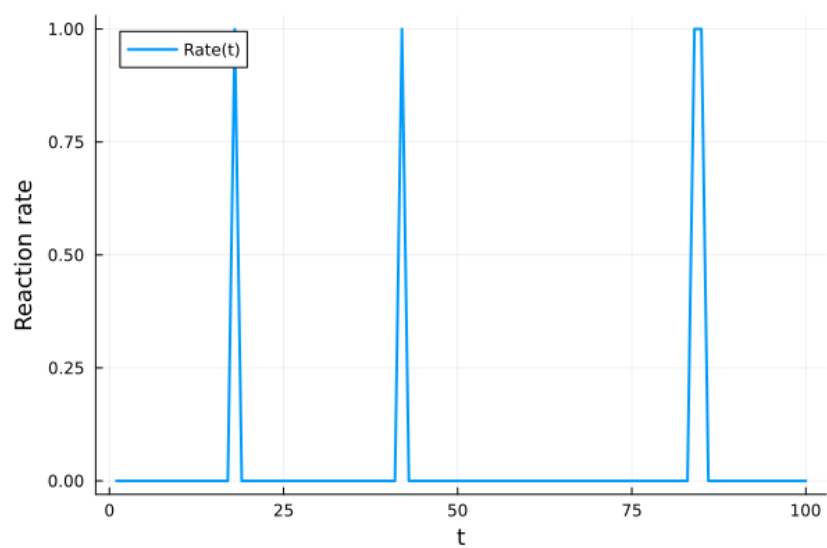


Рис. 3.4: График зависимости скорости реакции от времени

4 Код программы на языке Julia

```
using Random
using Plots

# Функция моделирует мономолекулярную экзотермическую реакцию в ансамбле частиц
# thermal = "zero" – температура постоянна
# thermal = "infinite" – система с бесконечной теплопроводностью (адиабатический

function simulate_reaction(N0, Ea, q, c, k, T0, dt, steps; thermal="zero")
    N, T = N0, T0 # Начальное количество частиц и температура
    Ns, Ts, vs = Float64[], Float64[], Float64[] # Массивы для хранения N(t), T(t), v(t)

    for _ in 1:steps # Цикл по временным шагам
        reacted = 0 # Счетчик среагировавших частиц на текущем шаге

        for _ in 1:N # Для каждой из оставшихся частиц
            E = -T * log(rand()) # Генерация энергии по экспоненциальному рас
            if E > Ea # Если энергия больше порога активации – реа
                reacted += 1
            end
        end
    end
end
```



```

    rate = reacted /  $\Delta t$           # Скорость реакции = число реакций / характерное время
    N -= reacted                    # Обновляем количество непрореагировавших частиц
    push!(Ns, N)                   # Сохраняем значение N(t)
    push!(vs, rate)                # Сохраняем скорость реакции

    # Если система адиабатическая (тепло не уходит), температура растет
    if thermal == "infinite"
        T += (q * reacted) / (N $\Delta t$  * c) # Повышение температуры на шаг
    end
    push!(Ts, T)                   # Сохраняем значение температуры
end

return Ns, Ts, vs                 # Возвращаем временные ряды для анализа
end

```

Пример сценария

```

N $\Delta t$  = 1000      # Начальное число частиц
Ea = 10.0          # Энергия активации
q = 2.0            # Количество тепла, выделяемое на реакцию
c = 1.0            # Удельная теплоемкость
 $\Delta t$  = 1.0        # Характерное время реакции
T $\Delta t$  = 1.0      # Начальная температура
dt = 1.0           # Шаг по времени (не используется напрямую)
steps = 100        # Общее число шагов моделирования

```

Первый случай – постоянная температура

```

Ns1, _, _ = simulate_reaction(N $\Delta t$ , Ea, q, c,  $\Delta t$ , T $\Delta t$ , dt, steps, thermal="zero")

```

```
# Второй случай – температура изменяется (адиабатическая система)
```

```
Ns2, Ts2, vs2 = simulate_reaction(N0, Ea, q, c, V, T0, dt, steps, thermal="infinite")
```

```
# Построение графиков
```

```
display(plot(1:steps, Ns1, label="N(t) при T=const", xlabel="t", ylabel="N(t)", lw=2))  
savefig("image1.png")
```

```
display(plot(1:steps, Ns2, label="N(t) при адиабате", lw=2))  
savefig("image2.png")
```

```
display(plot(1:steps, Ts2, label="T(t)", xlabel="t", ylabel="Temperature", lw=2))  
savefig("image3.png")
```

```
display(plot(1:steps, vs2, label="Rate(t)", xlabel="t", ylabel="Reaction rate", lw=2))  
savefig("image4.png")
```

5 Выводы

Во время выполнения третьего этапа проекта мы написали на языке Julia программу, моделирующую ансамбль частиц, в которых возможна мономолекулярная экзотермическая реакция. Рассмотрели различные ситуации:

1. Случай нулевой теплопроводности
2. Случай бесконечной теплопроводности

6 Список литературы

1. Медведев Д.А. и др. Моделирование физических процессов и явлений на ПК: Учеб. пособие. Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 2010. 101 с.
2. Gillespie D.T. Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions. *Journal of Physical Chemistry*. — 1977. — Vol. 81, No. 25. — P. 2340–2361.
3. Yu C., Cai L., Chen J.-Y. Stochastic Modeling of Partially Stirred Reactor (PaSR) for the Investigation of the Turbulence-Chemistry Interaction for the Ammonia-Air Combustion. *Flow, Turbulence and Combustion*. — 2023. — Vol. 111. — P. 575–597.