

Химические реакции, стохастическое горение

Этап 2. Алгоритмы моделирования

Озьяс Стив Икнэль Дани

Информация

- Озьяс Стев Икнэль Дани
- студент группы НКНбд-01-21
- Российский университет дружбы народов
- <https://github.com/Dacossti>



Цели и задачи работы

Цель лабораторной работы

Описать алгоритмы решения 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.

Описание алгоритмов

1. Инициализация: N_0 частиц, температура T_0 , параметры E_a , q , τ .
2. Для каждого временного шага:
 - Для каждой непрореагировавшей частицы:
 - Вычисляется энергия $E = -kT * \ln(\text{rand}())$.
 - Если $E > E_a$, частица реагирует.
 - Обновляется $N(t)$.
3. Построение графика $N(t)$.

Алгоритм для случая бесконечной теплопроводности (адиабатический процесс)

1. После реакции каждой частицы:

- Температура увеличивается:

$$\Delta T = \frac{q}{N_0 c}$$

2. Таким образом, с каждой реакцией растёт вероятность новых реакций.
3. Реакция моделируется до тех пор, пока $N \rightarrow 0$.

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{N}{\tau} e^{-E_a/kT}, \quad \frac{dT}{dt} = \frac{q}{N_0 c} \cdot \frac{N}{\tau} e^{-E_a/kT}$$

Метод Эйлера или метод Рунге-Кутты используем для численного решения.

Выводы по проделанной работе

Во время выполнения второго этапа проекта сделали теоретическое описание алгоритмов решения задачи в случаях нулевой теплопроводности и бесконечной теплопроводности.

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.