

Химические реакции, стохастическое горение

Этап 3. Комплексы программ

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

Обсуждать результаты проекта, самооценить деятельность.

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.

Процесс выполнения

В ходе моделирования были рассмотрены два предельных случая протекания мономолекулярной экзотермической реакции: при нулевой и бесконечной теплопроводности.

- **При нулевой теплопроводности** температура системы оставалась постоянной, что привело к экспоненциальному убыванию числа активных частиц. Поведение системы полностью согласуется с аналитическим решением уравнения первого порядка:

$$N(t) = N_0 e^{-ut}, \quad u = \frac{1}{\tau} e^{-E_a/kT}$$

Это подтверждает корректность стохастической реализации в условиях стационарной температуры.

- В случае бесконечной теплопроводности (адиабатический процесс) каждое химическое превращение сопровождалось ростом температуры, что, в свою очередь, увеличивало скорость последующих реакций. Такой положительный обратный эффект может привести к лавинообразному увеличению реакционной активности — аналог теплового взрыва.

Графики температуры и скорости реакции от времени показали экспоненциально ускоряющийся процесс в начальной фазе, с последующим насыщением при исчерпании активных частиц.

- Полученные численные данные демонстрируют хорошее согласие с теоретическими ожиданиями. Это подтверждает корректность как математической модели, так и алгоритма Монте-Карло, использованного для генерации случайных величин.

Проект был выполнен в полном объеме и охватывает все поставленные задачи: реализация стохастического моделирования химической реакции, сравнение различных тепловых режимов, визуализация результатов.

Язык Julia продемонстрировал высокую производительность и лаконичность при работе с массивами, случайными величинами и графиками. Особенно полезным оказалось использование встроенного логарифмического генератора распределения экспоненциальных энергий.

Работа над проектом позволила глубже понять: - физическую сущность экзотермических реакций, - влияние тепловых эффектов на динамику реакций, - принципы реализации стохастических моделей и численных методов решения дифференциальных уравнений.

Возможные направления для расширения и дальнейших исследований:

- **Введение обратной реакции** (модель $A \rightleftharpoons B$) и учет химического равновесия.
- **Моделирование теплоотвода** — например, за счет конечной теплопроводности или теплообмена с окружающей средой.
- **Переход к двумолекулярным реакциям** (например, $A + B \rightarrow C$), что потребует учета столкновений и пространственной плотности частиц.
- **Пространственное распределение частиц** и температурное поле, с возможностью моделирования локальных вспышек, диффузии тепла и фронта горения.

Такие расширения позволят приблизить модель к более реалистичным задачам, встречающимся в химической кинетике,

Выводы по проделанной работе

Во время выполнения итогового этапа проекта мы обсуждали результаты проекта, самооценили деятельность.

В ходе реализации проекта выполнили следующие задачи:

- Построение моделей химических реакций в условиях микроскопического ансамбля частиц в случаях нулевой теплопроводности и бесконечной теплопроводности;
- Описание алгоритмов решения задачи в обеих случаях;
- Создание программного комплекса на языке Julia для реализации задачи
- Обсуждение результата проекта, самооценка деятельности.