

Химические реакции, стохастическое горение

Этап 4. Защита проекта

Озьяс Стив Икнэль Дани

Содержание

1	Цель работы	3
2	Результаты	4
3	Самооценка	6
4	Перспективы	7
5	Выводы	8
6	Список литературы	9

1 Цель работы

Обсуждать результаты проекта, самооценить деятельность.

2 Результаты

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.

3 Самооценка

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.

4 Перспективы

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, $A + B \rightleftharpoons C$), что требует 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, горении и прикладной физике.

5 Выводы

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.

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.