

# **Химические реакции, стохастическое горение**

**Этап 2. Алгоритмы моделирования**

Озьяс Стев Икнэль Дани

# Содержание

<b>1</b>	<b>Цель работы</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Задачи</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Описание алгоритмов</b>	<b>5</b>
3.1	Алгоритм для случая нулевой теплопроводности . . . . .	5
3.2	Алгоритм для случая бесконечной теплопроводности (адиабатический процесс) . . . . .	5
3.3	Численное решение системы дифференциальных уравнений . . .	6
<b>4</b>	<b>Выводы</b>	<b>7</b>
<b>5</b>	<b>Список литературы</b>	<b>8</b>

# 1 Цель работы

Описать алгоритмы решения 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 Описание алгоритмов

### 3.1 Алгоритм для случая нулевой теплопроводности

1. Инициализация:  $N_0$  частиц, температура  $T_0$ , параметры  $E_a$ ,  $q$ ,  $\Delta t$ .
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  $N(t)$ .

### 3.2 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  $N \neq 0$ .

### 3.3 Численное решение системы дифференциальных уравнений

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{N}{\tau}e^{-E_a/kT}, \quad \frac{dT}{dt} = \frac{q}{N_0c} \cdot \frac{N}{\tau}e^{-E_a/kT}$$

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

## 4 Выводы

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

## 5 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.