

Химические реакции, стохастическое горение

Этап 1. Теоретическая модель

Озьяс Стев Икнэль Дани

Содержание

1	Введение	3
1.1	Научная проблема	3
1.2	Цель работы	3
1.3	Задачи	3
2	Теоретическое описание задачи	5
2.1	Описание модели	5
3	Выводы	7
4	Список литературы	8

1 Введение

1.1 Научная проблема

Моделирование химических реакций в условиях микроскопического ансамбля частиц — это ключ к пониманию динамики горения, катализаторов и других физических явлений. В частности, интерес представляет мономолекулярная экзотермическая реакция, где реакция $A \rightarrow B$ сопровождается выделением тепла. (medved:2010?).

1.2 Цель работы

Моделировать химические реакции в условиях микроскопического ансамбля частиц.

1.3 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 теплопро-

водности внутри области моделирования, считая процесс адиабатическим.

2 Теоретическое описание задачи

Для одной молекулы А вероятность реакции за время Δt определяется:

$$\alpha = \int_{E_a}^{\infty} \frac{1}{kT} e^{-E/kT} dE = e^{-E_a/kT}$$

Изменение количества непрореагировавших молекул:

$$\frac{dN}{dt} = -Nu, \quad u = \frac{1}{\tau} e^{-E_a/kT}$$

Решение:

$$N(t) = N_0 e^{-ut}$$

В случае **бесконечной теплопроводности**, температура меняется:

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

2.1 Описание модели

1. **Частицы** находятся в начальном состоянии А.
2. Для каждой частицы генерируется энергия: $E = -kT * \ln(\text{random}())$.
3. Реакция происходит, если $E > E_a$.
4. При реакции:
 - В случае нулевой теплопроводности: температура не меняется.

- В случае бесконечной теплопроводности: температура системы возрастает.

5. Статистика собирается для $N(t)$, $T(t)$, скорости реакции.

3 Выводы

Во время выполнения первого этапа проекта сделали теоретическое описание моделей химических реакций в условиях микроскопического ансамбля частиц в случаях нулевой теплопроводности и бесконечной теплопроводности. Далее определили задачи дальнейшего исследования.

4 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.