Химические реакции, стохастическое горение

Этап 1. Теоретическая модель

Озьяс Стев Икнэль Дани

Table of Contents

# 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 → 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 теплопроводности внутри области моделирования, считая процесс адиабатическим.

# 2 Теоретическое описание задачи

Для одной молекулы A вероятность реакции за время τ определяется:

Изменение количества непрореагировавших молекул:

Решение:

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

## 2.1 Описание модели

1. **Частицы** находятся в начальном состоянии A.
2. Для каждой частицы генерируется энергия: E = -kT \* ln(random()).
3. Реакция происходит, если E > Ea.
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.