Химические реакции, стохастическое горение

Этап 2. Алгоритмы моделирования

Озьяс Стев Икнэль Дани

Table of Contents

# 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: N₀ частиц, температура T₀, параметры Ea, q, τ.
2. Для каждого временного шага:
   * Для каждой непрореагировавшей частицы:
     + Вычисляется энергия E = -kT \* ln(rand()).
     + Если E > Ea, 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:
2. Таким образом, с каждой реакцией растёт вероятность новых реакций.
3. Реакция моделируется до тех пор, пока N → 0.

## 3.3 Численное решение системы дифференциальных уравнений

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.