

Химические реакции, стохастическое горение. Этап 1

Подготовили: Бабенко А., Кармацкий Н., Коняева М., Лебедева О., Легиньких Г., Самсонова М.

Группы: НФИбд-01-21 НФИбд-02-21

Руководитель: Кулябов Д. С.

Цель проекта

Целью нашего проекта является разработка и валидация новой комплексной математической модели стохастического горения, которая интегрирует усовершенствованные подходы, основанные на Уравнениях Ланжевена, Кинетическом Монте-Карло (КМС) и PDF (Вероятностное Распределение Функций), для глубокого понимания и предсказания динамики химических реакций в условиях высокой турбулентности и неоднородности.

Явление (объект) (1/3)

Стохастическое горение - сложное явление, ключевое в современных исследованиях физико-химических процессов. Оно характеризуется случайными колебаниями в химических реакциях горения, обусловленными множеством переменных.

Явление (объект) (2/3)

Фундаментальные аспекты стохастического горения включают турбулентность и химическую кинетику, гетерогенность топлива и окружающей среды, а также начальные условия. Турбулентность потоков влияет на скорость химических реакций, гетерогенность топлива и окружающей среды вызывает колебания в локальных условиях горения, а начальные условия могут привести к значительным отклонениям в динамике и итоговых характеристиках горения.

Явление (объект) (3/3)

Для изучения стохастического горения используются сложные статистические методы и численное моделирование, а также экспериментальное изучение с использованием современных методов диагностики.

Математическая модель: уравнение Ланжевена (1/3)

Уравнения Ланжевена используются для моделирования эволюции системы под влиянием случайного шума. Они позволяют учитывать случайные флуктуации и турбулентность в химических и физических процессах, что помогает лучше понять влияние микромасштабных флуктуаций на поведение системы в целом.

Формула:

$$\frac{dX(t)}{dt} = f(X(t), t) + g(X(t), t) \cdot \varepsilon(t)$$

Математическая модель: кинетическое Монте-Карло (КМС) (2/3)

Метод Кинетического Монте-Карло используется для моделирования химических реакций на атомном или молекулярном уровне, позволяя проследить эволюцию системы через серию случайных событий.

Формула:

$$p_i = 1 - e^{-k_i \Delta t}$$

Математическая модель: PDF (вероятностное распределение функций) (3/3)

Метод PDF используется для моделирования стохастических процессов в горении, представляя распределение вероятностей различных состояний системы, таких как температура, концентрация реагентов и продуктов.

Формула:

$$\frac{\partial P(X, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot J(X, t)$$

Области применения

1. Энергетика
2. Экология
3. Материаловедение
4. Авиационная и космическая
5. промышленность
6. Автомобильная промышленность

Новизна проекта

Новизна проекта заключается в синтезе трех подходов для точного предсказания и описания стохастических процессов горения. Эта модель способствует созданию энергоэффективных технологий, оптимизации систем сгорания, и поддерживает прогресс в автомобильной, энергетической и космической отраслях, с практической значимостью и коммерческой привлекательностью.

Литературный обзор

1. Пол Ланжевен: Ранние работы, объясняющие влияние микроскопических флуктуаций на стохастическое горение.
2. Даниэль Т. Гиллеспи: Работы по алгоритму Гиллеспи, демонстрирующие применение метода КМС для моделирования сложных химических систем.
3. Стивен Поуп: Вклад в разработку и применение PDF методов для турбулентного горения.
4. Дэвид Чандлер: Исследования динамики сложных систем, включая стохастическую динамику в химических реакциях.

5. Хин Рис: Применение методов математической статистики и численного моделирования для анализа стохастических аспектов химических реакций.
6. Петер Ханги: Исследования стохастических процессов в химических реакциях, включая влияние температурных флуктуаций и шумов.
7. Рудольф Маркус: Исследования электронных переходов в химических реакциях, включая стохастические аспекты.
8. Жан-Пьер Галлеви: Исследования химических реакций в неоднородных и нестационарных условиях, подчеркивающие роль стохастических процессов в динамике реакций.