



## **Химические реакции, стохастическое горение**

Выполнили: студенты гр. НПИбд-01-21:  
Маляров Семён Сергеевич,  
Астахова Марина Дмитриевна

# Введение

Процесс химических реакций и стохастическое горение являются одними из важных тем в сфере математического моделирования. Ввиду особенностей процесса задача моделирования состоит в построении модели, которая бы отвечала всем аспектам, влияющие на точность результата. Основной задачей является оптимизация модели, поскольку это, прежде всего, процесс, происходящий на молекулярном уровне. В данном проекте рассмотрено описание модели с учётом аспектов для получения эффективных результатов с помощью моделирования данного процесса

## Основные аспекты модели

1. Определение состояний системы: в модели определены возможные состояния системы, включая различные стадии горения и составы реагентов и продуктов химической реакции.
2. Стохастическая кинетика: с использованием методов стохастической кинетики учитывается случайная природа процессов, что позволяет моделировать реакции с учетом случайных событий реакции
3. Уравнения стохастической динамики: используются стохастические дифференциальные уравнения (SDE) для моделирования влияния случайных факторов на химические реакции и процессы горения.
4. Влияние параметров: модель учитывает влияние температуры, концентрации реагентов, давления и других параметров на характеристики реакции и горения.
5. Турбулентность и неоднородности: особое внимание уделяется учету турбулентности потоков, неоднородности вещества и других нестационарных явлений в системах.
6. Анализ вероятности: производится анализ вероятностных распределений, вероятностей переходов между состояниями и статистических параметров процесса.
7. Вычислительное моделирование: для моделирования стоит учитывать такие моменты как мощность и скорость вычислений.

## □ Описание модели

1. Определение состояний системы: модель определяет состояния системы для стохастического горения и химических реакций с учетом всех возможных состояний и переходов между ними.
2. Учет случайности: в модели учитываются случайные флуктуации и стохастические процессы, которые могут повлиять на исход химических реакций и горения.
3. Кинетика и скорость реакций: математическая модель включает описание кинетики реакций, скорости протекания процессов и расчет равновесных состояний системы.
4. Механизмы реакций: в модели учитывается структура и механизмы химических реакций, что позволяет предсказать поведение системы в различных условиях.
5. Факторы окружающей среды: влияние внешних факторов, таких как температура, давление, концентрация и катализаторы, учитываются при построении модели.
6. Анализ вероятностей: модель включает анализ вероятностей переходов между состояниями системы и предсказание вероятностных распределений.
7. Методы численного моделирования: для симуляции стохастического поведения системы применяются современные численные методы, например метод Монте-Карло или методы случайных процессов.

## ■ Выводы

Такая комплексная математическая модель позволяет анализировать и прогнозировать химические реакции и процессы горения с учетом всех важных факторов. Разработка точной и надежной модели является ключевым шагом в понимании и управлении сложными системами химических реакций и горения.