

ОРИГИНАЛЬНАЯ СТАТЬЯ

УДК 544.5; 662.612; 519.63

doi: 10.26907/2541-7746.2024.3.343-363

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК
ЗАЖИГАНИЯ ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО
ТЕПЛО ВЫДЕЛЯЮЩЕГО ОБРАЗЦА В СРЕДЕ
СО СЛУЧАЙНЫМИ КОЛЕБАНИЯМИ ТЕМПЕРАТУРЫ**

И.Г. Донской

Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, г. Иркутск, 664033, Россия

Аннотация

Рассмотрена задача тепловой устойчивости цилиндрического образца с нелинейным тепловыделением при случайном блуждании температуры окружающей среды. Исследовано поведение такой системы в зависимости от параметров задачи (интенсивности тепловыделения, дисперсии случайного блуждания). Для этого предложен численный алгоритм, основанный на усреднении множества реализаций случайного блуждания внешней температуры. Разработан численный метод решения задачи теплопроводности с источником и со случайными условиями на границе, сочетающий явные и неявные схемы для линейаризованных уравнений переноса и метод Эйлера – Маруямы. Получены распределения характеристик зажигания и моменты этих распределений, установлена их зависимость от параметров задачи.

Ключевые слова: тепловой взрыв, стохастическое дифференциальное уравнение, математическое моделирование, метод Монте-Карло

Введение

Химические реакции часто протекают в условиях с динамическими вариациями условий (температуры, давления, концентраций). Средняя скорость химической реакции при этом не всегда может быть оценена по средним значениям определяющих параметров. В простейших случаях вариации условий можно представить в виде шумов с заданными спектральными характеристиками. Оценка влияния этих характеристик на скорость реакции (в частности) и устойчивости реакционной системы (в целом) является важной задачей, которая, однако, требует специального исследования для каждого отдельного набора химических реакций и диапазона условий.

Особую значимость флуктуационные процессы приобретают в связи с задачами, связанными с тепловой устойчивостью химических реакторов и других теплонапряженных устройств, например, при исследовании аварийных режимов электрохимических элементов и способов их предупреждения [1, 2]. Модели случайного блуждания используются, например, для исследования транспорта частиц в пористых средах [3–5], в атмосферных потоках [6], в пламенах [7–9], а также на поверхностях (что особенно важно для гетерогенных каталитических реакций) [10, 11].

Широко используются перколяционные модели разложения и горения материалов [12–14], а также изменения структуры пористых сред [15].

Влияние флуктуаций на развитие теплового взрыва в адиабатических системах исследовалось в работах [16–18], где впервые был установлен различный характер развития флуктуаций в докритических и сверхкритических условиях. Более простые модели были предложены для сложных химических реакций в изотермических условиях [19–21], в т. ч. для цепной реакции со стохастическим обрывом [22]. Флуктуации и связанные с ними отклонения от детерминированного поведения становятся значительными для систем с малым числом реагирующих частиц [23–25]. Неадиабатические системы с линейными теплопотерями, приводящие к моделям типа Семенова, рассматривались авторами [26, 27]; флуктуации коэффициента массопереноса для гетерогенной экзотермической реакции – в работе [28].

Взаимное влияние химической реакции и процессов переноса на уровне флуктуаций существует даже несмотря на различную векторную размерность соответствующих потоков [29]. В работах [30, 31] было рассмотрено флуктуационное взаимовлияние химической реакции и коэффициентов переноса; в работе [32] выведены флуктуационно-диссипационные соотношения для массопереноса и химических реакций (при отсутствии массопереноса такие соотношения приведены в [33, 34]). Уравнения химической кинетики могут быть выражены с помощью марковских аппроксимаций [35, 36], и для таких системы разработаны численные алгоритмы решения на основе метода Монте-Карло [37, 38] (в т. ч. на основе методов расщепления [39]). Бистабильные потенциалы для уравнений реакции – диффузии использованы в [40, 41] для исследования устойчивости. Задача теплового взрыва с флуктуациями температуры рассмотрена авторами [42, 43]; влияние флуктуаций скорости реакции на устойчивость плоских образцов исследована с помощью метода Ляпунова в [44].

Важным объектом исследования являются простейшие реакторы, такие как реакторы идеального перемешивания. При исследовании этих реакторов основным параметром является отношение времени пребывания реагентов (интегральная характеристика процессов переноса) к скорости химической реакции. Флуктуации могут наблюдаться для расхода реагентов в изотермических реакторах [45, 46], для скорости перемешивания [47] и начальной температуры реагентов [48]. Независимые случайные колебания температуры и концентрации на входе в реактор рассмотрены в работе [49]. Для адиабатического реактора были получены бимодальные распределения, похожие на наблюдаемые в закрытых системах [50]. Управление реакторами с целью подавления опасных колебаний построено в работе [51].

Другим примером реактора с существенным влиянием стохастичности является зернистый слой со случайно расположенными активными центрами. Такие системы численно исследованы в работах [52, 53], где для случайных засыпок были получены статистические данные по ансамблям стационарных решений. Важным приложением стохастического моделирования является реагирование в турбулентных потоках, где большую роль играют методы Монте-Карло. Первые численные модели перемешивания в однофазных и дисперсных потоках были предложены в работах [54, 55]. При моделировании турбулентного горения использованы также модели неполного перемешивания и стохастических флеймлетов [56, 57]. Варьирование параметров реакционной способности часто применяется для определения наиболее вероятных диапазонов скоростей химических реакций и уточнения кинетических данных [58–61].

Применительно к теме настоящей работы необходимо отдельно указать работы И.В. Деревича с соавторами, в которых исследованы статистика поведения одиночных реагирующих частиц в стохастических средах [62, 63], а также влияние стохастического распределения активных центров в пористых каталитических гранулах на их тепловые режимы [64] (подобная постановка рассмотрена также в работе [65] для плоской симметрии). Одномерная задача теплового взрыва с колебаниями температуры на границе для сферической симметрии рассмотрена в работе [66], где были получены уравнения для функции плотности вероятности нахождения в разных температурных состояниях. В настоящей работе нестационарная одномерная задача теплопроводности с нелинейным источником и стохастическими колебаниями температуры окружающей среды численно решена для цилиндрической симметрии. Предметом исследования является зависимость ожидаемых характеристик зажигания (времени, температуры среды, тепловых потоков на поверхности частицы) от интенсивности флуктуаций, которые представлены белым шумом.

1. Постановка задачи и численный алгоритм

Рассмотрим уравнение в частных производных, описывающее процесс теплопроводности в области с нелинейным тепловыделением в безразмерных переменных:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right) + Fk \exp \left(\frac{\theta}{1 + Ar\theta} \right). \quad (1)$$

Здесь θ – температура, ξ – пространственная координата, t – время, Fk – тепловыделение при начальной температуре ($\theta = 0$) и Ar – параметр, учитывающий снижение чувствительности тепловыделения с ростом температуры. Уравнение (1) является одним из основных объектов исследования в теории горения [67].

Будем считать, что ось симметрии цилиндрического образца соответствует $\xi = 0$:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \xi}(t, 0) = 0. \quad (2)$$

На внешней границе ($\xi = 1$) температура образца равна температуре окружающей среды:

$$\theta(t, 1) = \theta_{env}(t). \quad (3)$$

В детерминированных постановках температура окружающей среды может быть постоянной [68] либо изменяться по заданному закону [69] (в т.ч. нелинейно [70]). Ключевым является параметр Fk , для которого существует критическое значение, выше которого система (1)–(3) не имеет ограниченного решения. Критическое значение параметра Fk для цилиндрической симметрии при $\theta_{env} = 0$ равно 2 [67]. С ростом температуры окружающей среды критическое значение Fk уменьшается экспоненциально. В стохастической постановке эта температура является случайным процессом, который генерируется некоторым шумом [62, 66]. Для упрощения расчетов примем, что температура окружающей среды определяется случайным блужданием (белый шум):

$$d\theta_{env} = \sigma \delta W. \quad (4)$$

В уравнении (4) σ – дисперсия случайного блуждания, δW – случайное приращение винеровского процесса. Тогда задача (1)–(4) определяет множество возможных реализаций, которые рано или поздно приведут к тепловому взрыву в образце: ожидаемое время зажигания зависит от дисперсии случайного блуждания и степени близости параметра Fk к критическому значению [71]. В работе [66] дан метод

расчета функции плотности вероятностей для осредненной температуры частицы. Более простую оценку вероятности достижения условий теплового взрыва для заданного временного промежутка можно получить, например, используя квазистационарное приближение [72], однако такое приближение дает систематическую ошибку, связанную с нестационарностью процесса. В связи с этим на настоящий момент наиболее надежным методом решения системы уравнений (1)–(4) является прямое численное моделирование (метод Монте-Карло).

Разностная схема для уравнения (1) выглядит следующим образом:

$$\theta_i - \theta_i^0 = Fo \left[\frac{\xi_{i-1}}{\xi_i} \theta_{i-1} - \left(1 + \frac{\xi_{i-1}}{xi_i} \theta_i + \theta_{i+1} \right) \right] + \tau S_i^0. \quad (5)$$

Здесь Fo – сеточное число Фурье ($Fo = \tau/h^2$, где τ – шаг временной сетки, h – шаг пространственной сетки), S – функция источника ($S_i = Fk \exp \theta_i^0 / (1 + Ar \theta_i^0)$), индекс 0 относится к предыдущему временному слою. Схема (5) комбинирует неявный метод для определения температуры с источником в явной форме (что позволяет упростить расчеты, правда, за счет понижения порядка сходимости). Граничные условия линеаризуются следующим образом:

$$\theta_1 - \theta_2 = 0, \quad (6)$$

$$\theta_N = \theta_N^0 + \sigma \eta \sqrt{\tau}. \quad (7)$$

Здесь $\eta \sim \mathcal{N}(0, 1)$, т.е. имеет нормальное распределение с нулевым средним и единичной дисперсией. Уравнение (7) представляет собой реализацию метода Эйлера–Маруямы [72]. Сходимость представленной схемы исследована в работах [65, 73], где был показан первый порядок сходимости по шагам пространственной и временной сеток. Отметим, что температура окружающей среды может расти и уменьшаться с одинаковой вероятностью, поэтому даже для условий, заведомо закритических с точки зрения детерминированной модели, могут наблюдаться стабильные (ограниченно) стохастические режимы.

Разностная схема (5)–(7) была использована для численного интегрирования системы уравнений (1)–(4) на заданном временном интервале (40 условных временных единиц) с начальным условием

$$\theta(0, \xi) = 0. \quad (8)$$

Шаг пространственной сетки равен $h = 0.001$, шаг временной сетки также равен $\tau = 0.001$. Параметрами для расчетов являются значения начальной интенсивности тепловыделения Fk и дисперсии случайного блуждания σ . Значения Fk варьируются от 0.5 до 3 с шагом 0.5 (как указано выше, критическое значение Fk для детерминированной задачи с постоянной температурой окружающей среды равно 2 [67]); значения дисперсии случайного блуждания варьируются от 0.1 до 1 с шагом 0.1. Для получения нужного объема статистических данных проводились по 1000 расчетов с разными случайными траекториями температуры окружающей среды, задаваемыми уравнением (7). Параметр Ar для всех случаев равен 0.02. Физический смысл этого параметра – отношение начальной температуры к энергии активации химической реакции, и большинство реакций горения характеризуется, как правило, малыми значениями Ar (в классических работах часто используется приближение $Ar = 0$). Выбранное значение соответствует химической реакции с энергией активации порядка 120 кДж/моль; в этом диапазоне значений влияние параметра Ar на условия зажигания незначительно [74].

Критическим условиям в задаче о тепловом взрыве (1) соответствует достижение бесконечно большой температуры за конечное время. Этот критерий, естественно, сложно реализовать в расчетах. Кроме того, на границе критических условий резко возрастает время зажигания [44]. В связи с этим предлагается использовать ослабленный, но просто реализуемый критерий. Условием теплового взрыва считается достижение достаточно высокой температуры в образце: при достижении значения максимальной температуры образца порядка 10 (как правило, в его центре) расчеты быстро расходятся, поэтому вычисления можно остановить. По результатам многовариантных запусков оцениваются вероятность зажигания образца, а также распределение характерных величин, соответствующих условиям зажигания: время зажигания; максимальная температура окружающей среды, достигнутая за время расчета; температура окружающей среды в момент зажигания и тепловые потоки на внешней границе (последние интересны с практической точки зрения: эти величины доступны для измерения в экспериментальных условиях).

Изменение температуры образца во времени показано на рис. 1. При $\sigma = 0$ (детерминированная задача) время зажигания бесконечно велико, наблюдается монотонный рост температуры с выходом на стационарное решение. С ростом σ усиливаются колебания на внешней границе ($\xi = 1$), причем эти колебания могут как ускорять, так и замедлять зажигание (в примере с $\sigma = 0.5$ температура долгое время блуждает в субкритической области, поэтому зажигание существенно затягивается). Максимальная температура во всех случаях достигается в центре образца. Множество решений, полученных таким образом, осредняется и анализируется. Результаты осреднения и анализа представлены в следующем разделе.

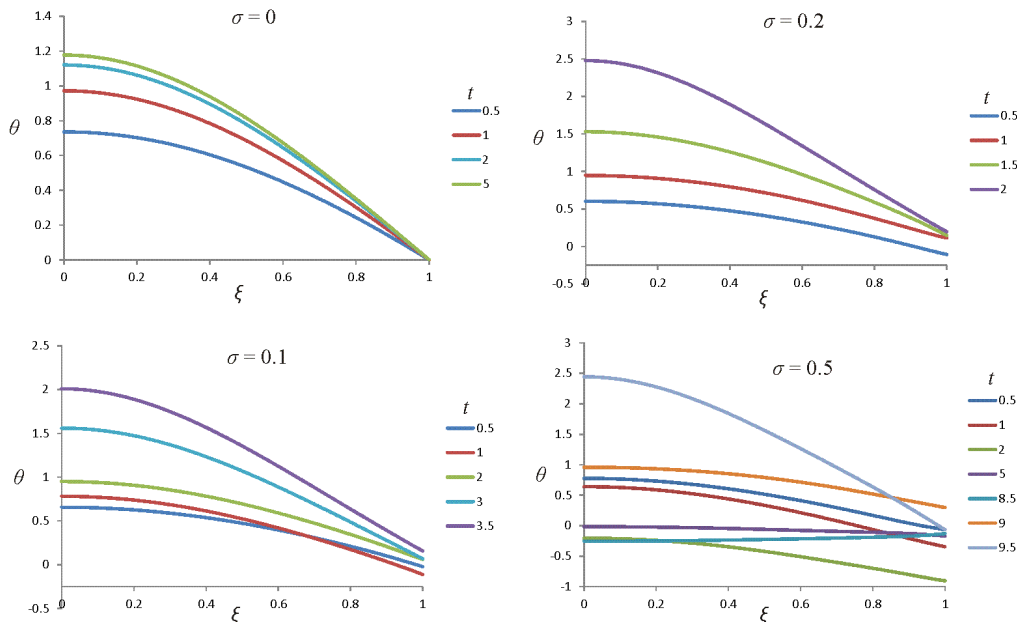


Рис. 1. Примеры расчетов температуры внутри образца при разных значениях σ и t ($Fk = 2$)

2. Результаты расчетов и их обсуждение

Вероятность зажигания рассчитана как отношение числа расчетов, в которых максимальная температура преодолевает значение 10, к их общему числу. Зависимость вероятности зажигания от параметров Fk и σ представлена на рис. 2. Для малых значений параметра Fk вероятность растет с дисперсией случайного блуждания, т.е. с ростом σ возрастает вероятность достижения достаточно высокой температуры окружающей среды, при которой установленное значение Fk становится критическим. При $Fk = 2$ (критическое значение для детерминированной задачи) зажигание происходит в 80–90 % случаев: флуктуации внешней температуры могут привести к охлаждению, и тогда образец оказывается стабильным. С дальнейшим увеличением параметра Fk зависимость обращается: вероятность зажигания уменьшается с дисперсией случайного блуждания, что связано с увеличением доли случайных траекторий, приводящих систему в безопасную температурную область. Та же картина видна на рис. 3, где показана зависимость среднего времени зажигания: для малых Fk процесс зажигания лимитируется случайным блужданием внешней температуры (времена зажигания имеют порядок полного времени расчета); для больших Fk становится все более значительной вероятность «случайного охлаждения».

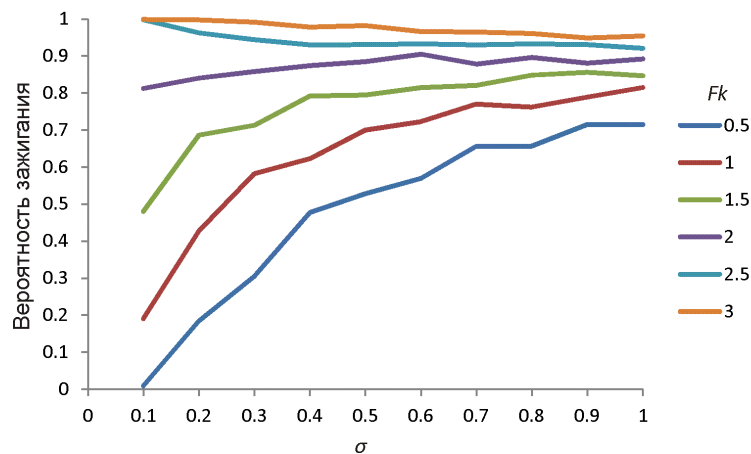


Рис. 2. Вероятность зажигания образца за $t = 40$

Помимо среднего времени зажигания, была рассчитана также его дисперсия (см. рис. 4). Интересно, что при значениях Fk в диапазоне от 1 до 2 дисперсия времени зажигания слабо зависит от шага случайного блуждания, а для малых и больших значений Fk поведение дисперсии качественно одинаково (рост вместе с σ).

Распределение времени зажигания при $Fk = 1$ (критическая температура для этого значения составляет около 0.7) представлено на рис. 5, где показано смещение ожидаемого времени зажигания в сторону меньших значений: с ростом σ увеличивается вероятность того, что температура окружающей среды достигнет критического значения.

Температура в момент зажигания далеко не всегда превышает критическую (см. рис. 6). Более того, в редких случаях зажигание происходит даже при температуре окружающей среды меньше начальной. Это связано с запаздыванием

зажигания по сравнению с изменением температуры: развитие тепловых возмущений может приобрести необратимый характер уже после достижения пиковой температуры, распределение которой показано на рис. 7.

Оценка теплового состояния теплонапряженных устройств, как правило, проводится по его внешним характеристикам, т. е. по условиям на границе. Поэтому помимо температуры окружающей среды исследуется также тепловой поток на внешней границе:

$$q = -\frac{\partial \theta}{\partial \xi}(t, 1). \quad (9)$$

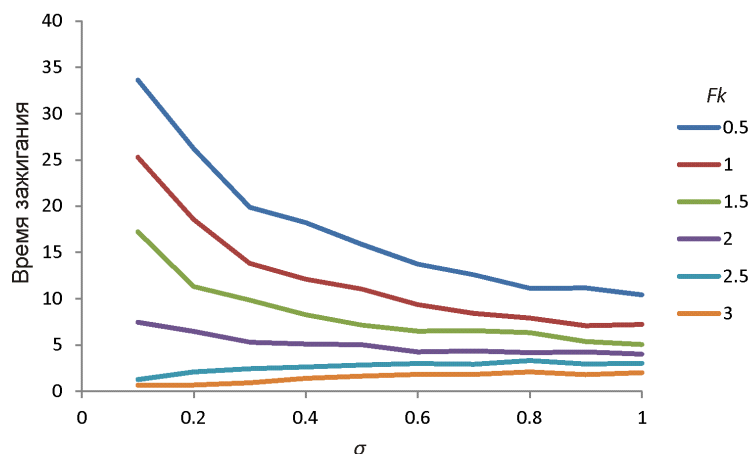


Рис. 3. Среднее время зажигания

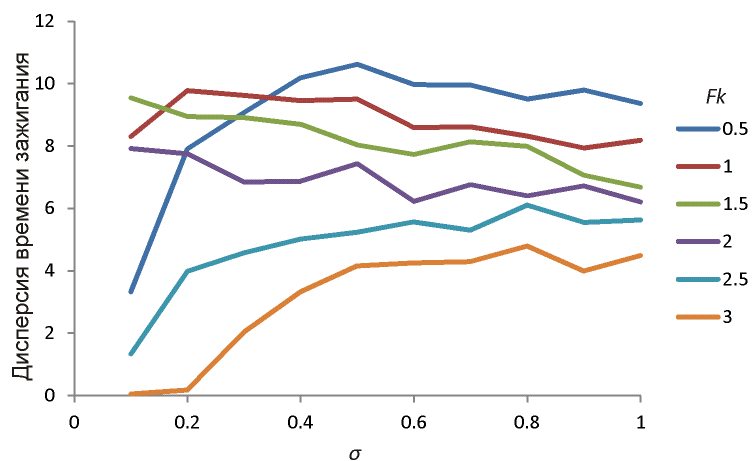
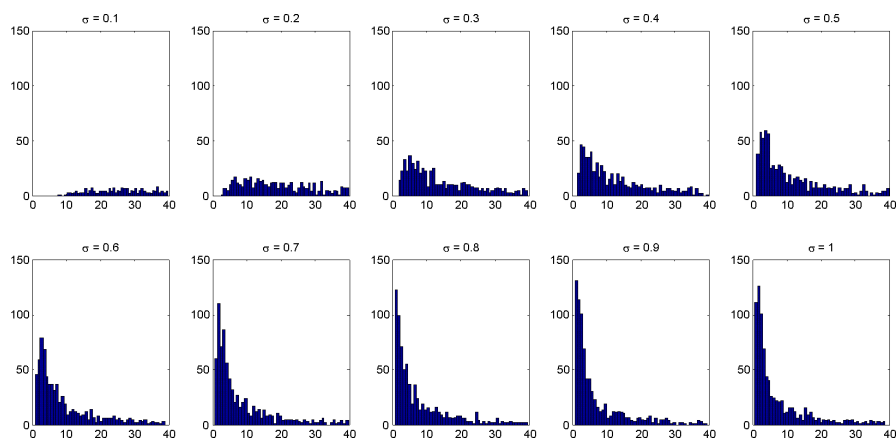
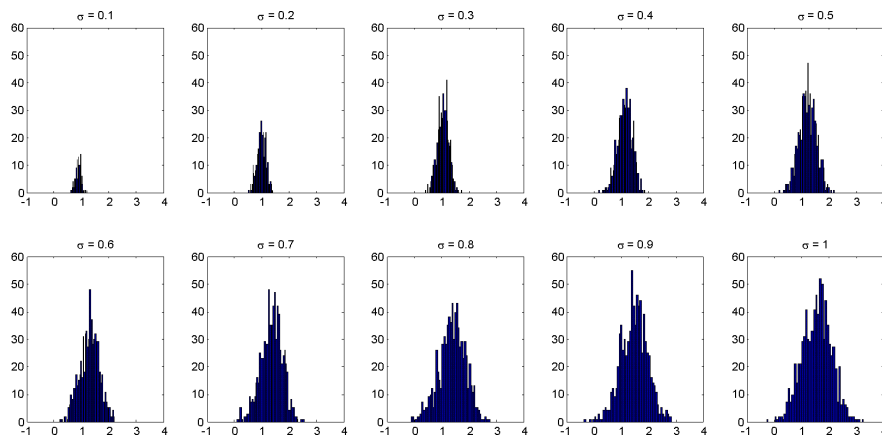
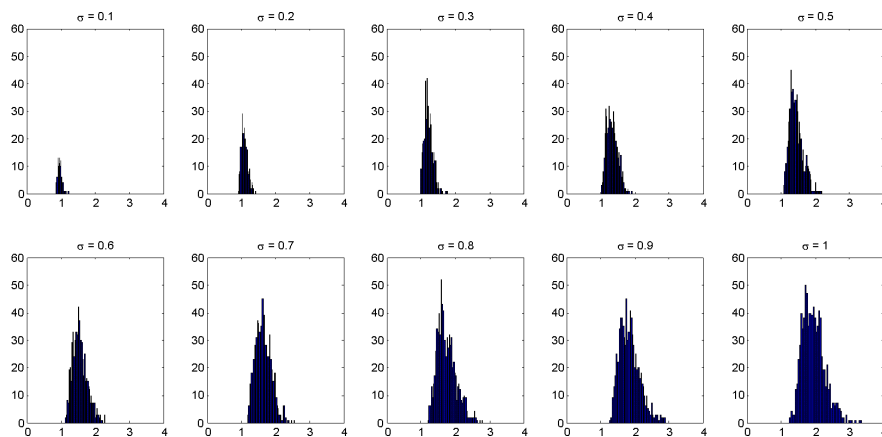


Рис. 4. Дисперсия времени зажигания

Зависимость среднего теплового потока на границе от параметров Fk и σ представлена на рис. 8: интенсивность теплопотерь для всех случаев примерно линейно снижается с ростом дисперсии случайного блуждания, что связано с ростом температуры окружающей среды. Максимальное значение теплового потока слабо зависит от параметра Fk , поскольку соответствует предвзрывному состоянию с

Рис. 5. Распределение времен зажигания для $Fk = 1$ Рис. 6. Распределение температуры окружающей среды в момент зажигания для $Fk = 1$ Рис. 7. Распределение максимальной температуры окружающей среды за все время расчета для $Fk = 1$

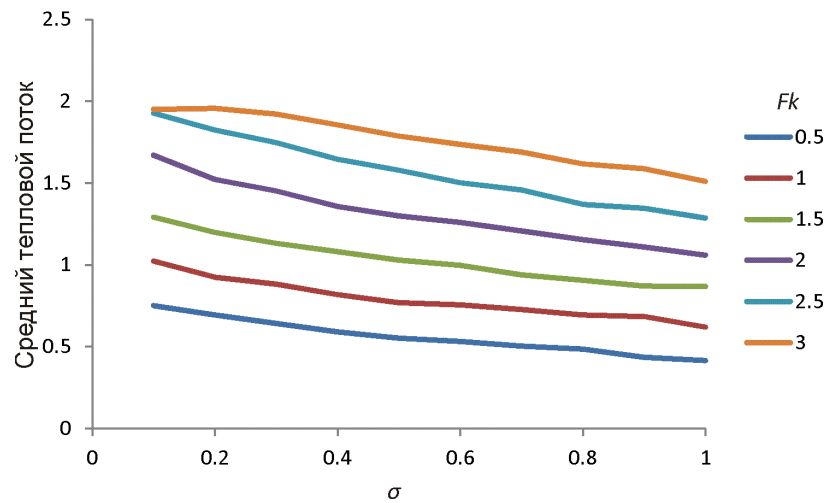


Рис. 8. Зависимость среднего теплового потока (9) от параметров Fk и σ

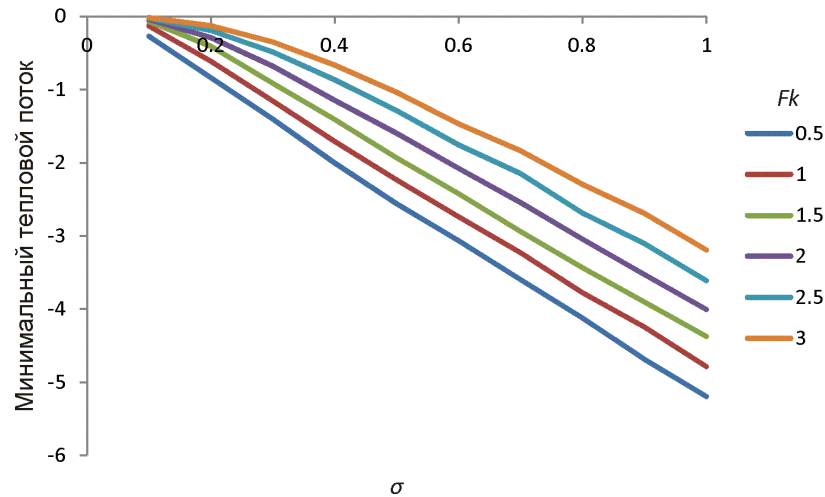
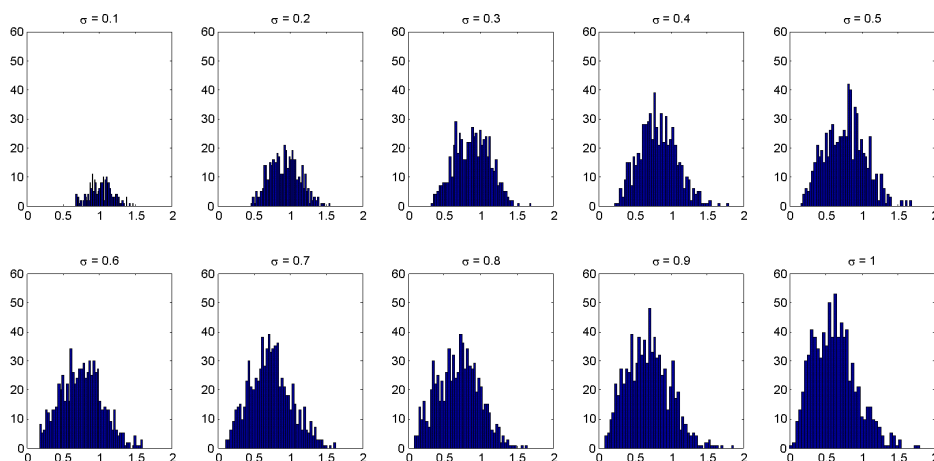
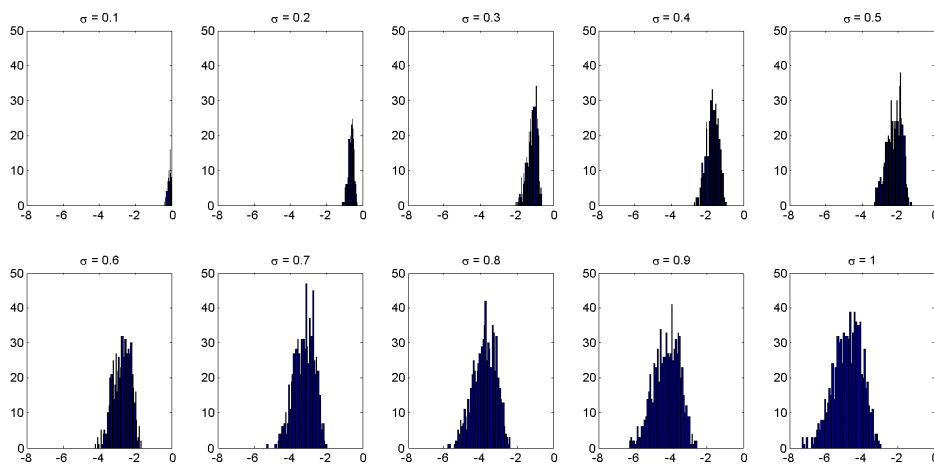


Рис. 9. Зависимость минимального теплового потока (9) от параметров Fk и σ

примерно одинаковой максимальной температурой. Зависимость для минимального теплового потока за все время представлено на рис. 9. Эта величина оказывается более чувствительной к дисперсии случайного блуждания. Кроме того, зажигание во всех случаях протекает в тех случаях, когда наблюдается существенный поток теплоты по направлению из окружающей среды к образцу, т. е. при отрицательных значениях (9).

Распределение среднего и минимального тепловых потоков для $Fk = 1$ показано на рис. 10 и 11. Средний тепловой поток для всех случаев положителен, однако минимальный тепловой поток при этом оказывается существенным.

Полученные расчеты показывают закономерности, которые могут быть применены, например, при разработке методов управления тепловым состоянием устройств с высокой чувствительностью к перегреву, например, электрохимических элементов и каталитических реакторов [1, 51]. Среди таких методов мо-

Рис. 10. Средний тепловой поток на внешней границе образца для $Fk = 1$ Рис. 11. Минимальный тепловой поток на внешней границе образца для $Fk = 1$

гут быть пассивные (добавление теплопоглощающих элементов [75]) и активные (конвективное охлаждение [76]). Например, для теплофизических и реакционных свойств, типичных для литиевых батарей [77, 78], параметр Fk имеет порядок единицы при температурах около 400 К ($Ar = 0.022$). Тогда ожидаемое время теплового взрыва (выхода батареи из строя) может быть оценено, если известны характеристики случайных колебаний в среде, в которой находится батарея. Колебания могут быть связаны с естественной конвекцией, погодными условиями, аварийными ситуациями и т. д.

Заключение

Для исследования характеристик зажигания реагирующего тепловыделяющего образца в стохастической среде использован численный алгоритм, реализующий метод Монте-Карло для нестационарной задачи теплового взрыва со случайным блужданием температуры окружающей среды. Получены зависимости этих характеристик от параметров задачи (интенсивности тепловыделения в начальном

состоянии и дисперсии блуждания), для каждого сочетания параметров проведены расчеты для 1000 случайных траекторий. Результаты расчетов показали качественные различия в зависимости вероятности зажигания от дисперсии случайного блуждания для докритических и сверхкритических значений интенсивности тепловыделения. Показано изменение тепловых потоков на границе области в критических режимах: несмотря на то, что средний тепловой поток направлен от образца к окружающей среде, зажигание происходит только при наличии периодов внешнего нагрева. Полученные результаты могут быть полезны при разработке методов управления тепловым состоянием теплонапряженных устройств в стохастических условиях.

Благодарности. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-00406 (<https://rscf.ru/project/23-29-00406/>).

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

1. *Mallick S., Gayen D.* Thermal behaviour and thermal runaway propagation in lithium-ion battery systems — a critical review // *J. Energy Storage*. 2023. V. 62. Art. 106894. <https://doi.org/10.1016/j.est.2023.106894>.
2. *Fu H., Wang J., Li L., Gong J., Wang X.* Numerical study of mini-channel liquid cooling for suppressing thermal runaway propagation in a lithium-ion battery pack // *Appl. Therm. Eng.* 2023. V. 234, Art. 121349. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2023.121349>.
3. *Drewry H.P.G., Seaton N.A.* Continuum random walk simulations of diffusion and reaction in catalyst particles // *AIChE J.* 1995. V. 41, No 4. P. 880–893. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2023.121349>.
4. *Feres R., Yablonsky G.S., Mueller A., Baernstein A., Zheng X., Gleaves J.T.* Probabilistic analysis of transport–reaction processes over catalytic particles: Theory and experimental testing // *Chem. Eng. Sci.* 2009. V. 64, No 3. P. 568–581. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2008.09.033>.
5. *Zielinski J.M., Petersen E.E.* Monte Carlo simulation of diffusion and chemical reaction in catalyst pores // *AIChE J.* 1987. V. 33, No 12. P. 1993–1997. <https://doi.org/10.1002/aic.690331208>.
6. *Garmory A., Richardson E.S., Mastorakos E.* Micromixing effects in a reacting plume by the Stochastic Fields method // *Atmos. Environ.* 2006. V. 40, No 6. P. 1078–1091. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.11.002>.
7. *Ghoniem A.F., Oppenheim A.K.* Numerical solution for the problem of flame propagation by the random element method // *AIAA J.* 1984. V. 22, No 10. P. 1429–1435. <https://doi.org/10.2514/3.8799>.
8. *Бетев А.С., Киверин А.Д., Медведев С.П., Яковенко И.С.* Численное моделирование режимов турбулентного горения водорода вблизи бедного предела // *Хим. физ.* 2020. Т. 39, № 12. С. 17–23. <https://doi.org/10.31857/S0207401X2012002X>.
9. *Tunér M.* Stochastic reactor models for engine simulations. Doctoral Thesis. Lund: Lund Univ., 2008. 194 p.
10. *Keil F.J.* Diffusion and reaction in porous networks // *Catal. Today*. 1999. V. 53, No 2. P. 245–258. [https://doi.org/10.1016/S0920-5861\(99\)00119-4](https://doi.org/10.1016/S0920-5861(99)00119-4).
11. *Zhdanov V.P., Kasemo B.* Simulations of the reaction kinetics on nanometer supported catalyst particles // *Surf. Sci. Rep.* 2000. V. 39, Nos 2–4. P. 25–104. [https://doi.org/10.1016/S0167-5729\(00\)00004-2](https://doi.org/10.1016/S0167-5729(00)00004-2).

12. Kerstein A.R., Edwards B.F. Percolation model for simulation of char oxidation and fragmentation time-histories // Chem. Eng. Sci. 1987. V. 42, No 7. P. 1629–1634. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(87\)80167-7](https://doi.org/10.1016/0009-2509(87)80167-7).
13. Гринчук П.С. Горение гетерогенных систем со стохастической пространственной структурой вблизи пределов распространения // ИФЖ. 2013. Т. 86, № 4. С. 819–831.
14. Xin H., Wang C., Louw E., Wang D., Mathews J.P. Atomistic simulation of coal char isothermal oxy-fuel combustion: Char reactivity and behavior // Fuel. 2016. V. 182. P. 935–943. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2016.05.103>.
15. Panga M.K.R., Ziauddin M., Balakotaiah V. Two-scale continuum model for simulation of wormholes in carbonate acidization // AIChE J. 2005. V. 51, No 12. P. 3231–3248. <https://doi.org/10.1002/aic.10574>.
16. Baras F., Nicolis G., Mansour M.M., Turner J.W. Stochastic theory of adiabatic explosion // J. Stat. Phys. 1983. V. 32, No 1. P. 1–23. <https://doi.org/10.1007/BF01009416>.
17. de Pasquale F., Mecozzi A. Theory of chemical fluctuations in thermal explosions // Phys. Rev. A. 1985. V. 31, No 4. Art. 2454. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.31.2454>.
18. Fernandez A. Theory of scaling for fluctuations in thermal explosion conditions // Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 1987. V. 91, No 2. P. 159–163. <https://doi.org/10.1002/bbpc.19870910216>.
19. Frankowicz M., Nicolis G. Transient evolution towards a unique stable state: Stochastic analysis of explosive behavior in a chemical system // J. Stat. Phys. 1983. V. 3, No 3. P. 595–609 <https://doi.org/10.1007/BF01018836>.
20. Frankowicz M., Mansour M.M., Nicolis G. Stochastic analysis of explosive behaviour: A qualitative approach // Physica. 1984. V. 125, No 1. P. 237–246. [https://doi.org/10.1016/0378-4371\(84\)90011-6](https://doi.org/10.1016/0378-4371(84)90011-6).
21. van Kampen N.G. Intrinsic fluctuations in explosive reactions // J. Stat. Phys. 1987. V. 46, No 5. P. 933–948. <https://doi.org/10.1007/BF01011150>.
22. Vlad M.O., Ross J. A stochastic approach to nonequilibrium chain reactions in disordered systems: Breakdown of eikonal approximation // Int. J. Thermophys. 1997. V. 18, No 4. P. 957–975. <https://doi.org/10.1007/BF02575241>.
23. Gorecki J., Popielawski J. On the stochastic theory of adiabatic thermal explosion in small systems — numerical results // J. Stat. Phys. 1986. V. 44, No 5. P. 941–954. <https://doi.org/10.1007/BF01011916>.
24. Zheng Q., Ross J. Comparison of deterministic and stochastic kinetics for nonlinear systems // J. Chem. Phys. 1991. V. 94, No 5. P. 3644–3648. <https://doi.org/10.1063/1.459735>.
25. Chou D.-P., Lackner T., Yip S. Fluctuation effects in models of adiabatic explosion // J. Stat. Phys. 1992. V. 69, No 1. P. 193–215. <https://doi.org/10.1007/BF01053790>.
26. Nowakowski B., Lemarchand A. Thermal explosion near bifurcation: Stochastic features of ignition // Phys. A. 2002. V. 311, Nos 1–2. P. 80–96. [https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(02\)00824-5](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(02)00824-5).
27. Lemarchand A., Nowakowski B. Fluctuation-induced and nonequilibrium-induced bifurcations in a thermochemical system // Mol. Simul. 2004. V. 30, Nos 11–12. P. 773–780. <http://dx.doi.org/10.1080/0892702042000270151>.
28. Бувич Ю.А., Федотов С.П. Формирование режимов гетерогенной реакции под воздействием мультипликативного шума // ИФЖ. 1987. Т. 53, № 5. С. 802–807.
29. Wei J. Irreversible thermodynamics in engineering // Ind. Eng. Chem. 1966. V. 58, No 10. P. 55–60. <https://doi.org/10.1021/ie50682a010>.

30. *van der Broeck C., Parrondo J.M.R., Toral R., Kawai R.* Nonequilibrium phase transitions induced by multiplicative noise // *Phys. Rev. E.* 1997. V. 55, No 4. Art. 4084. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.55.4084>.
31. *Bedeaux D., Pagonabarraga I., Ortiz de Zárate J.M., Sengers J.V., Kjølstrup S.* Mesoscopic non-equilibrium thermodynamics of non-isothermal reaction-diffusion // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2010. V. 12. P. 12780–12793. <https://doi.org/10.1039/C0CP00289E>.
32. *Bochkov G.N., Orlov A.L., Kolpashchikov V.L.* Fluctuation-dissipation models of mass transfer in systems with chemical reactions // *Int. Commun. Heat Mass Transfer.* 1985. V. 12, No 1. P. 33–43. [https://doi.org/10.1016/0735-1933\(85\)90005-3](https://doi.org/10.1016/0735-1933(85)90005-3).
33. *Schmiedl T., Seifert U.* Stochastic thermodynamics of chemical reaction networks // *J. Chem. Phys.* 2007. V. 126. Art. 044101. <https://doi.org/10.1063/1.2428297>.
34. *Ge H., Qian H.* Mathematical formalism of nonequilibrium thermodynamics for nonlinear chemical reaction systems with general rate law // *J. Stat. Phys.* 2017. V. 166, No 1. P. 190–209. <https://doi.org/10.1007/s10955-016-1678-6>.
35. *Darvey I.G., Staff P.J.* Stochastic approach to first-order chemical reaction kinetics // *J. Chem. Phys.* 1966. V. 44. P. 990–997. <https://doi.org/10.1063/1.1726855>.
36. *van Kampen N.G.* The equilibrium distribution of a chemical mixture // *Phys. Lett. A.* 1976. V. 59, No 5. P. 333–334. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(76\)90398-4](https://doi.org/10.1016/0375-9601(76)90398-4).
37. *Gillespie D.T.* Stochastic simulation of chemical kinetics // *Annu. Rev. Phys. Chem.* 2007. V. 58. P. 35–55. <https://doi.org/10.1146/annurev.physchem.58.032806.104637>.
38. *Higham D.J.* Modeling and simulating chemical reactions // *SIAM Rev.* 2008. V. 50, No 2. P. 347–368. <https://doi.org/10.1137/060666457>.
39. *Sandu A.* A new look at the chemical master equation // *Numer. Algorithms.* 2014. V. 65, No 3. P. 485–498. <https://doi.org/10.1007/s11075-013-9758-z>.
40. *Schlögl F.* Stochastic measures in nonequilibrium thermodynamics // *Phys. Rep.* 1980. V. 62, No 4. P. 267–380. [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(80\)90019-8](https://doi.org/10.1016/0370-1573(80)90019-8).
41. *Montefusco A., Peletier M.A., Öttinger H.C.* A framework of nonequilibrium statistical mechanics. II. Coarse-graining // *J. Non-Equilib. Thermodyn.* 2021. V. 46, No 1. P. 15–33. <https://doi.org/10.1515/jnet-2020-0068>.
42. *Fernández A., Rabitz H.* The scaling of nonequilibrium fluctuations in gaseous thermal explosions // *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* 1988. V. 92, No 6. P. 754–760. <https://doi.org/10.1002/bbpc.198800184>.
43. *Baer M.R., Gartling D.K., Desjardin P.E.* Probabilistic models for reactive behaviour in heterogeneous condensed phase media // *Combust. Theory Modell.* 2012. V. 16, No 1. P. 75–106. <https://doi.org/10.1080/13647830.2011.606916>.
44. *Fedotov S.P.* Stochastic analysis of the thermal ignition of a distributed explosive system // *Phys. Lett. A.* 1993. V. 176, Nos 3–4. P. 220–224. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(93\)91038-7](https://doi.org/10.1016/0375-9601(93)91038-7).
45. *Baratti R., Tronci S., Schaum A., Alvarez J.* Dynamics of nonlinear chemical process with multiplicative stochastic noise // *IFAC-PapersOnLine.* 2016. V. 49, No 7. P. 869–874. <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2016.07.299>.
46. *Schaum A., Tronci S., Baratti R., Alvarez J.* On the dynamics and robustness of the chemostat with multiplicative noise // *IFAC-PapersOnLine.* 2021. V. 54, No 3. P. 342–347. <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2021.08.265>.
47. *Leicher J., Wirtz S., Scherer V.* Evaluation of an entropy-based combustion model using stochastic reactors // *Chem. Eng. Technol.* 2008. V. 31, No 7. P. 964–970. <https://doi.org/10.1002/ceat.200700463>.
48. *Rao N.J., Ramkrishna D., Borwanker J.D.* Nonlinear stochastic simulation of stirred tank reactors // *Chem. Eng. Sci.* 1974. V. 29, No 5. P. 1193–1204. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(74\)80118-1](https://doi.org/10.1016/0009-2509(74)80118-1).

49. *Alvarez J., Baratti R.* On the closed-loop stochastic dynamics of two-state nonlinear exothermic CSTRs with PI temperature control // *Comput. Chem. Eng.* 2023. V. 174. Art. 108246. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2023.108246>.
50. *Oberlack M., Arlitt R., Peters N.* On stochastic Damköhler number variations in a homogeneous flow reactor // *Combust. Theory Modell.* 2000. V. 4, No 4. P. 495–509. <https://doi.org/10.1088/1364-7830/4/4/307>.
51. *Bashkirtseva I.* Controlling the stochastic sensitivity in thermochemical systems under incomplete information // *Kybernetika.* 2018. V. 54, No 1. P. 96–109. <http://doi.org/10.14736/kyb-2018-1-0096>.
52. *Calverley E.M., Witt P.M., Sweeney J.D.* Reactor runaway due to statistically driven axial activity variations in graded catalyst beds // *Chem. Eng. Sci.* 2012. V. 80. P. 393–401. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2012.06.047>.
53. *Ganzer G., Freund H.* Influence of statistical activity variations in diluted catalyst beds on the thermal reactor behavior: Derivation of an a priori criterion // *Chem. Eng. Sci.* 2020. V. 220. Art. 115607. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2020.115607>.
54. *Curl R.L.* Dispersed phase mixing: I. Theory and effects in simple reactors // *AIChE J.* 1963. V. 9, No 2. P. 175–181. <https://doi.org/10.1002/aic.690090207>.
55. *Kerstein A.R.* One-dimensional turbulence: Model formulation and application to homogeneous turbulence, shear flows, and buoyant stratified flows // *J. Fluid Mech.* 1999. V. 392. P. 277–334. <https://doi.org/10.1017/S0022112099005376>.
56. *Correa S.M.* Turbulence-chemistry interactions in the intermediate regime of premixed combustion // *Combust. Flame.* 1993. V. 93, Nos 1–2. P. 41–60. [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(93\)90083-F](https://doi.org/10.1016/0010-2180(93)90083-F).
57. *Iavarone S., Péquin A., Chen Z.X., Doan N.A.K., Swaminathan N., Parente A.* An a priori assessment of the Partially Stirred Reactor (PaSR) model for MILD combustion // *Proc. Combust. Inst.* 2021. V. 38, No 4. P. 5403–5414. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.06.234>.
58. *Медведев В.Г., Телегин В.Г., Телегин Г.Г.* Статистический анализ кинетики адиабатического теплового взрыва // *ФГВ.* 2009. № 3. С. 44–48.
59. *Tomlin A.S., Turányi T.* Investigation and improvement of reaction mechanisms using sensitivity analysis and optimization // *Cleaner Combustion: Developing Detailed Chemical Kinetic Models* / Ed. by F. Battin-Leclerc, J.M. Simmie, E. Blurock. Ser.: Green Energy and Technology. London: Springer, 2013. P. 411–445. https://doi.org/10.1007/978-1-4471-5307-8_16.
60. *Gel A., Chaudhari K., Turton R., Nicoletti P.* Application of uncertainty quantification methods for coal devolatilization kinetics in gasifier modeling // *Powder Technol.* 2014. V. 265. P. 66–75. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2014.01.024>.
61. *Fischer M., Vignes A.* An imprecise Bayesian approach to thermal runaway probability // *Proc. 12th Int. Symp. on Imprecise Probability: Theories and Applications. Ser.: Proceedings of Machine Learning Research (PMLR).* 2021. V. 147. P. 150–160.
62. *Derevich I.V.* Effect of temperature fluctuations of fluid on thermal stability of particles with exothermic chemical reaction // *Int. J. Heat Mass Transfer.* 2010. V. 53, Nos 25–26. P. 5920–5932. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.07.031>.
63. *Derevich I., Galdina D.* Simulation of thermal explosion of catalytic granule in fluctuating temperature field // *J. Appl. Math. Phys.* 2013. V. 1, No 5. P. 1–7. <http://dx.doi.org/10.4236/jamp.2013.15001>.
64. *Derevich I.V., Ermolaev V.S., Mordkovich V.Z., Solomonik I.G., Fokina A.Yu.* Heat and mass transfer in Fischer–Tropsch catalytic granule with localized cobalt microparticles // *Int. J. Heat Mass Transfer.* 2018. V. 121. P. 1335–1349. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.01.077>.

65. Донской И.Г., Гросс Е.И. Численный анализ стохастических закономерностей теплового зажигания в стохастической среде // Информ. и матем. техн. в науке и управл. 2024. № 1. С. 66–77. <https://doi.org/10.25729/ESI.2024.33.1.006>.
66. Деревич И.В., Клочков А.К. Тепловой взрыв одиночных частиц в случайном поле температуры среды // ТВТ. 2023. Т. 61, № 1. С. 108–117. <https://doi.org/10.31857/S0040364423010039>.
67. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987. 502 с.
68. Мержанов А.Г., Озерковская Н.И., Шкадинский К.Г. Динамика теплового взрыва в послеиндукционный период // ФГВ. 1999. Т. 35, № 6. С. 65–70.
69. Барзыкин В.В. Тепловой взрыв при линейном нагреве // ФГВ. 1973. № 1. С. 37–54.
70. Novozhilov V. Thermal explosion in oscillating ambient conditions // Sci. Rep. 2016. V. 6, No 1. Art. 29730. <https://doi.org/10.1038/srep29730>.
71. Fedotov S.P. Statistical model of the thermal ignition of a distributed system // Combust. Flame. 1992. V. 91, No 1. P. 65–70. [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(92\)90127-B](https://doi.org/10.1016/0010-2180(92)90127-B).
72. Kloeden P.E., Platen E. Numerical Solution of Stochastic Differential Equations. Ser.: Stochastic Modelling and Applied Probability. Vol. 23. Berlin, Heidelberg: Springer, 1992. xxxvi, 636 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-12616-5>.
73. Donskoy I. Thermal explosion problem with a stochastic boundary: quasi-stationary approximation and direct numerical modelling // Research Square. Preprint. 2023. <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-3464165/v1>.
74. Takeno T. Ignition criterion by thermal explosion theory // Combust. Flame. 1977. V. 29. P. 209–211. [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(77\)90108-0](https://doi.org/10.1016/0010-2180(77)90108-0).
75. Wilke S., Schweitzer B., Khateeb S., Al-Hallaj S. Preventing thermal runaway propagation in lithium ion battery packs using a phase change composite material: An experimental study // J. Power Sources. 2017. V. 340. P. 51–59. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.11.018>.
76. Shahid S., Agelin-Chaab M. A review of thermal runaway prevention and mitigation strategies for lithium-ion batteries // Energy Convers. Manage.: X. 2022. V. 16. Art. 100310. <https://doi.org/10.1016/j.ecmx.2022.100310>.
77. Chen M., Sun Q., Li Y., Wu K., Liu B., Peng P., Wang Q. A thermal runaway simulation on a lithium titanate battery and the battery module // Energies. 2015. V. 8, No 1. P. 490–500. <https://doi.org/10.3390/en8010490>.
78. Feng X., He X., Ouyang M., Wang L., Lu L., Ren D., Santhanagopalan S. A coupled electrochemical-thermal failure model for predicting the thermal runaway behavior of lithium-ion batteries // J. Electrochem. Soc. 2018. V. 165, No 16. Art. A3748. <https://doi.org/10.1149/2.0311816jes>.

Поступила в редакцию 17.07.2024

Принята к публикации 24.08.2024

Донской Игорь Геннадьевич, доктор технических наук, старший научный сотрудник
Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН
ул. Лермонтова, д. 130, г. Иркутск, 664033, Россия
E-mail: donskoy.chem@mail.ru

ORIGINAL ARTICLE

doi: 10.26907/2541-7746.2024.3.343-363

**Numerical Modeling of the Ignition Characteristics
of a Cylindrical Heat-Generating Sample in a Medium
with Stochastic Temperature Variations**

*I.G. Donskoy**Melentiev Energy Systems Institute, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences,
Irkutsk, 664933 Russia*E-mail: *donskoy.chem@mail.ru*

Received July 17, 2024; Accepted August 24, 2024

Abstract

The problem of thermal stability of a cylindrical sample with nonlinear heat generation placed in a medium with the ambient temperature random walk was studied. The behavior of this system was examined depending on the parameters of the problem (heat generation intensity, random walk variance). A numerical algorithm based on averaging multiple random trajectories of the ambient temperature was proposed. A numerical method was developed for solving the heat transfer problem with the heat source and stochastic boundary which combines both explicit and implicit schemes for linearized transfer equations and the Euler–Maruyama method. The distributions of ignition characteristics and their moments were obtained. Their dependencies on the parameters of the problem were investigated.

Keywords: thermal explosion, stochastic differential equation, mathematical modeling, Monte Carlo method

Acknowledgments. This study was supported by the Russian Science Foundation (project no. 23-29-00406, <https://rscf.ru/project/23-29-00406/>.)

Conflicts of Interest. The authors declare no conflicts of interest.

Figure Captions

- Fig. 1. Temperature profiles inside the sample for various values of σ and t ($Fk = 2$).
Fig. 2. Probability of sample ignition at $t = 40$.
Fig. 3. Average ignition time.
Fig. 4. Variance of ignition time.
Fig. 5. Distribution of ignition times for $Fk = 1$.
Fig. 6. Ambient temperature distribution at the moment of ignition for $Fk = 1$.
Fig. 7. Maximum ambient temperature distribution over the entire calculation period for $Fk = 1$.
Fig. 8. Average heat flux (9) dependence on Fk and σ .
Fig. 9. Minimum heat flux (9) dependence on Fk and σ .
Fig. 10. Average heat flux at the outer boundary of the sample for $Fk = 1$.
Fig. 11. Minimum heat flux at the outer boundary of the sample for $Fk = 1$.

References

1. Mallick S., Gayen D. Thermal behaviour and thermal runaway propagation in lithium-ion battery systems – a critical review. *J. Energy Storage*, 2023, vol. 62, art. 106894. <https://doi.org/10.1016/j.est.2023.106894>.
2. Fu H., Wang J., Li L., Gong J., Wang X. Numerical study of mini-channel liquid cooling for suppressing thermal runaway propagation in a lithium-ion battery pack. *Appl. Therm. Eng.*, 2023, vol. 234, art. 121349. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2023.121349>.
3. Drewry H.P.G., Seaton N.A. Continuum random walk simulations of diffusion and reaction in catalyst particles. *AIChE J.*, 1995, vol. 41, no. 4, pp. 880–893. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2023.121349>.
4. Feres R., Yablonsky G.S., Mueller A., Baernstein A., Zheng X., Gleaves J.T. Probabilistic analysis of transport–reaction processes over catalytic particles: Theory and experimental testing. *Chem. Eng. Sci.*, 2009, vol 64, no. 3, pp. 568–581. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2008.09.033>.
5. Zielinski J.M., Petersen E.E. Monte Carlo simulation of diffusion and chemical reaction in catalyst pores. *AIChE J.*, 1987, vol. 33, no. 12, pp. 1993–1997. <https://doi.org/10.1002/aic.690331208>.
6. Garmory A., Richardson E.S., Mastorakos E. Micromixing effects in a reacting plume by the Stochastic Fields method. *Atmos. Environ.*, 2006, vol. 40, no. 6, pp. 1078–1091. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.11.002>.
7. Ghoniem A.F., Oppenheim A.K. Numerical solution for the problem of flame propagation by the random element method. *AIAA J.*, 1984, vol. 22, no. 10, pp. 1429–1435. <https://doi.org/10.2514/3.8799>.
8. Betev A.S., Kiverin A.D., Medvedev S.P., Yakovenko I.S. Numerical simulation of turbulent hydrogen combustion regimes near the lean limit. *Russ. J. Phys. Chem.*, 2020, vol. 14, no. 6, pp. 940–945. <https://doi.org/10.1134/S1990793120060160>.
9. Tunér M. Stochastic reactor models for engine simulations. *Doctoral Thesis*. Lund, Lund Univ., 2008. 194 p.
10. Keil F.J. Diffusion and reaction in porous networks. *Catal. Today*, 1999, vol. 53, no. 2, pp. 245–258. [https://doi.org/10.1016/S0920-5861\(99\)00119-4](https://doi.org/10.1016/S0920-5861(99)00119-4).
11. Zhdanov V.P., Kasemo B. Simulations of the reaction kinetics on nanometer supported catalyst particles. *Surf. Sci. Rep.*, 2000, vol. 39, nos. 2–4, pp. 25–104. [https://doi.org/10.1016/S0167-5729\(00\)00004-2](https://doi.org/10.1016/S0167-5729(00)00004-2).
12. Kerstein A.R., Edwards B.F. Percolation model for simulation of char oxidation and fragmentation time-histories. *Chem. Eng. Sci.*, 1987, vol. 42, no. 7, pp. 1629–1634. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(87\)80167-7](https://doi.org/10.1016/0009-2509(87)80167-7).
13. Grinchuk P.S. Combustion of heterogeneous systems with a stochastic spatial structure near the propagation limits. *J. Eng. Phys. Thermophys.*, 2013, vol. 86, no. 4, pp. 875–887. <https://doi.org/10.1007/s10891-013-0907-y>.
14. Xin H., Wang C., Louw E., Wang D., Mathews J.P. Atomistic simulation of coal char isothermal oxy-fuel combustion: Char reactivity and behavior. *Fuel*, 2016, vol. 182, pp. 935–943. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2016.05.103>.
15. Panga M.K.R., Ziauddin M., Balakotaiah V. Two-scale continuum model for simulation of wormholes in carbonate acidization. *AIChE J.*, 2005, vol. 51, no. 12, pp. 3231–3248. <https://doi.org/10.1002/aic.10574>.
16. Baras F., Nicolis G., Mansour M.M., Turner J.W. Stochastic theory of adiabatic explosion. *J. Stat. Phys.*, 1983, vol. 32, no. 1, pp. 1–23. <https://doi.org/10.1007/BF01009416>.
17. de Pasquale F., Mecozzi A. Theory of chemical fluctuations in thermal explosions. *Phys. Rev. A*, 1985, vol. 31, no. 4, art. 2454. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.31.2454>.

18. Fernandez A. Theory of scaling for fluctuations in thermal explosion conditions. *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 1987, vol. 91, no. 2, pp. 159–163. <https://doi.org/10.1002/bbpc.19870910216>.
19. Frankowicz M., Nicolis G. Transient evolution towards a unique stable state: Stochastic analysis of explosive behavior in a chemical system. *J. Stat. Phys.*, 1983, vol. 3, no. 3, pp. 595–609. <https://doi.org/10.1007/BF01018836>.
20. Frankowicz M., Mansour M.M., Nicolis G. Stochastic analysis of explosive behaviour: A qualitative approach. *Physica*, 1984, vol. 125, no. 1, pp. 237–246. [https://doi.org/10.1016/0378-4371\(84\)90011-6](https://doi.org/10.1016/0378-4371(84)90011-6).
21. van Kampen N.G. Intrinsic fluctuations in explosive reactions. *J. Stat. Phys.*, 1987, vol. 46, no. 5, P. 933–948. <https://doi.org/10.1007/BF01011150>.
22. Vlad M.O., Ross J. A stochastic approach to nonequilibrium chain reactions in disordered systems: Breakdown of eikonal approximation. *Int. J. Thermophys.*, 1997, vol. 18, no. 4, pp. 957–975. <https://doi.org/10.1007/BF02575241>.
23. Gorecki J., Popielawski J. On the stochastic theory of adiabatic thermal explosion in small systems — numerical results. *J. Stat. Phys.*, 1986, vol. 44, no. 5, pp. 941–954. <https://doi.org/10.1007/BF01011916>.
24. Zheng Q., Ross J. Comparison of deterministic and stochastic kinetics for nonlinear systems. *J. Chem. Phys.*, 1991, vol. 94, no. 5, pp. 3644–3648. <https://doi.org/10.1063/1.459735>.
25. Chou D.-P., Lackner T., Yip S. Fluctuation effects in models of adiabatic explosion. *J. Stat. Phys.*, 1992, vol. 69, no. 1, pp. 193–215. <https://doi.org/10.1007/BF01053790>.
26. Nowakowski B., Lemarchand A. Thermal explosion near bifurcation: Stochastic features of ignition. *Phys. A*, 2002, vol. 311, nos. 1–2, pp. 80–96. [https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(02\)00824-5](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(02)00824-5).
27. Lemarchand A., Nowakowski B. Fluctuation-induced and nonequilibrium-induced bifurcations in a thermochemical system. *Mol. Simul.*, 2004, vol. 30, nos. 11–12, pp. 773–780. <http://dx.doi.org/10.1080/0892702042000270151>.
28. Buevich Yu.A., Fedotov S.P. Formation of heterogeneous reaction regimes under the action of multiplicative noise. *J. Eng. Phys.*, 1987, vol. 53, no. 5, pp. 1302–1306. <https://doi.org/10.1007/BF00871092>.
29. Wei J. Irreversible thermodynamics in engineering. *Ind. Eng. Chem.*, 1966, vol. 58, no. 10, pp. 55–60. <https://doi.org/10.1021/ie50682a010>.
30. van der Broeck C., Parrondo J.M.R., Toral R., Kawai R. Nonequilibrium phase transitions induced by multiplicative noise. *Phys. Rev. E*, 1997, vol. 55, no. 4, art. 4084. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.55.4084>.
31. Bedeaux D., Pagonabarraga I., Ortiz de Zárate J.M., Sengers J.V., Kjelstrup S. Mesoscopic non-equilibrium thermodynamics of non-isothermal reaction-diffusion. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2010, vol. 12, pp. 12780–12793. <https://doi.org/10.1039/C0CP00289E>.
32. Bochkov G.N., Orlov A.L., Kolpashchikov V.L. Fluctuation-dissipation models of mass transfer in systems with chemical reactions. *Int. Commun. Heat Mass Transfer*, 1985, vol. 12, no. 1, pp. 33–43. [https://doi.org/10.1016/0735-1933\(85\)90005-3](https://doi.org/10.1016/0735-1933(85)90005-3).
33. Schmiedl T., Seifert U. Stochastic thermodynamics of chemical reaction networks. *J. Chem. Phys.*, 2007, vol. 126, art. 044101. <https://doi.org/10.1063/1.2428297>.
34. Ge H., Qian H. Mathematical formalism of nonequilibrium thermodynamics for nonlinear chemical reaction systems with general rate law. *J. Stat. Phys.*, 2017, vol. 166, no. 1, pp. 190–209. <https://doi.org/10.1007/s10955-016-1678-6>.
35. Darvey I.G., Staff P.J. Stochastic approach to first-order chemical reaction kinetics. *J. Chem. Phys.*, 1966, vol. 44, pp. 990–997. <https://doi.org/10.1063/1.1726855>.

36. van Kampen N.G. The equilibrium distribution of a chemical mixture. *Phys. Lett. A*, 1976, vol. 59, no. 5, pp. 333–334. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(76\)90398-4](https://doi.org/10.1016/0375-9601(76)90398-4).
37. Gillespie D.T. Stochastic simulation of chemical kinetics. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 2007. V. 58. P. 35–55. <https://doi.org/10.1146/annurev.physchem.58.032806.104637>.
38. Higham D.J. Modeling and simulating chemical reactions. *SIAM Rev.*, 2008, vol. 50, no. 2, pp. 347–368. <https://doi.org/10.1137/060666457>.
39. Sandu A. A new look at the chemical master equation. *Numer. Algorithms*, 2014, vol. 65, no. 3, pp. 485–498. <https://doi.org/10.1007/s11075-013-9758-z>.
40. Schlögl F. Stochastic measures in nonequilibrium thermodynamics. *Phys. Rep.*, 1980, vol. 62, no. 4, pp. 267–380. [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(80\)90019-8](https://doi.org/10.1016/0370-1573(80)90019-8).
41. Montefusco A., Peletier M.A., Öttinger H.C. A Framework of nonequilibrium statistical mechanics. II. coarse-graining. *J. Non-Equilib. Thermodyn.*, 2021, vol. 46, no. 1, pp. 15–33. <https://doi.org/10.1515/jnet-2020-0068>.
42. Fernández A., Rabitz H. The scaling of nonequilibrium fluctuations in gaseous thermal explosions. *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 1988, vol. 92, no. 6, pp. 754–760. <https://doi.org/10.1002/bbpc.198800184>.
43. Baer M.R., Gartling D.K., Desjardin P.E. Probabilistic models for reactive behaviour in heterogeneous condensed phase media. *Combust. Theory Modell.*, 2012, vol. 16, no. 1, pp. 75–106. <https://doi.org/10.1080/13647830.2011.606916>.
44. Fedotov S.P. Stochastic analysis of the thermal ignition of a distributed explosive system. *Phys. Lett. A*, 1993, vol. 176, nos. 3–4, pp. 220–224. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(93\)91038-7](https://doi.org/10.1016/0375-9601(93)91038-7).
45. Baratti R., Tronci S., Schaum A., Alvarez J. Dynamics of nonlinear chemical process with multiplicative stochastic noise. *IFAC-PapersOnLine*, 2016, vol. 49, no. 7, pp. 869–874. <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2016.07.299>.
46. Schaum A., Tronci S., Baratti R., Alvarez J. On the dynamics and robustness of the chemostat with multiplicative noise. *IFAC-PapersOnLine*, 2021, vol. 54, no. 3, pp. 342–347. <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2021.08.265>.
47. Leicher J., Wirtz S., Scherer V. Evaluation of an entropy-based combustion model using stochastic reactors. *Chem. Eng. Technol.*, 2008, vol. 31, no. 7, pp. 964–970. <https://doi.org/10.1002/ceat.200700463>.
48. Rao N.J., Ramkrishna D., Borwanker J.D. Nonlinear stochastic simulation of stirred tank reactors. *Chem. Eng. Sci.*, 1974 vol. 29, no. 5, pp. 1193–1204. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(74\)80118-1](https://doi.org/10.1016/0009-2509(74)80118-1).
49. Alvarez J., Baratti R. On the closed-loop stochastic dynamics of two-state nonlinear exothermic CSTRs with PI temperature control. *Comput. Chem. Eng.*, 2023, vol. 174, art. 108246. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2023.108246>.
50. Oberlack M., Arlitt R., Peters N. On stochastic Damköhler number variations in a homogeneous flow reactor. *Combust. Theory Modell.*, 2000, vol. 4, no. 4, pp. 495–509. <https://doi.org/10.1088/1364-7830/4/4/307>.
51. Bashkirtseva I. Controlling the stochastic sensitivity in thermochemical systems under incomplete information. *Kybernetika*, 2018, vol. 54, no. 1, pp. 96–109. <http://doi.org/10.14736/kyb-2018-1-0096>.
52. Calverley E.M., Witt P.M., Sweeney J.D. Reactor runaway due to statistically driven axial activity variations in graded catalyst beds. *Chem. Eng. Sci.*, 2012, vol. 80, pp. 393–401. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2012.06.047>.
53. Ganzer G., Freund H. Influence of statistical activity variations in diluted catalyst beds on the thermal reactor behavior: Derivation of an a priori criterion. *Chem. Eng. Sci.*, 2020, vol. 220, art. 115607. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2020.115607>.

54. Curl R.L. Dispersed phase mixing: I. Theory and effects in simple reactors. *AIChE J.*, 1963, vol. 9, no. 2, pp. 175–181. <https://doi.org/10.1002/aic.690090207>.
55. Kerstein A.R. One-dimensional turbulence: Model formulation and application to homogeneous turbulence, shear flows, and buoyant stratified flows. *J. Fluid Mech.*, 1999, vol. 392, pp. 277–334. <https://doi.org/10.1017/S0022112099005376>.
56. Correa S.M. Turbulence-chemistry interactions in the intermediate regime of premixed combustion. *Combust. Flame*, 1993, vol. 93, nos. 1–2, pp. 41–60. [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(93\)90083-F](https://doi.org/10.1016/0010-2180(93)90083-F).
57. Iavarone S., Péquin A., Chen Z.X., Doan N.A.K., Swaminathan N., Parente A. An a priori assessment of the Partially Stirred Reactor (PaSR) model for MILD combustion. *Proc. Combust. Inst.*, 2021, vol. 38, no. 4, pp. 5403–5414. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.06.234>.
58. Medvedev V.G., Telegin V.G., Telegin G.G. Statistical analysis of kinetics of an adiabatic thermal explosion. *Combust., Explos., Shock Waves*, 2009, vol. 45, no. 3, pp. 274–277. <https://doi.org/10.1007/s10573-009-0036-2>.
59. Tomlin A.S., Turányi T. Investigation and improvement of reaction mechanisms using sensitivity analysis and optimization. In: Battin-Leclerc F., Simmie J.M., Blurock E. (Eds.) *Cleaner Combustion: Developing Detailed Chemical Kinetic Models*. Ser.: Green Energy and Technology. London, Springer, 2013, pp. 411–445. https://doi.org/10.1007/978-1-4471-5307-8_16.
60. Gel A., Chaudhari K., Turton R., Nicoletti P. Application of uncertainty quantification methods for coal devolatilization kinetics in gasifier modeling. *Powder Technol.*, 2014, vol. 265, pp. 66–75. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2014.01.024>.
61. Fischer M., Vignes A. An imprecise Bayesian approach to thermal runaway probability. *Proc. 12th Int. Symp. on Imprecise Probability: Theories and Applications*. Ser.: Proceedings of Machine Learning Research (PMLR). 2021, vol. 147, pp. 150–160.
62. Derevich I.V. Effect of temperature fluctuations of fluid on thermal stability of particles with exothermic chemical reaction. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2010, vol. 53, nos. 25–26, pp. 5920–5932. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.07.031>.
63. Derevich I., Galdina D. Simulation of thermal explosion of catalytic granule in fluctuating temperature field. *J. Appl. Math. Phys.*, 2013, vol. 1, no. 5, pp. 1–7. <http://dx.doi.org/10.4236/jamp.2013.15001>.
64. Derevich I.V., Ermolaev V.S., Mordkovich V.Z., Solomonik I.G., Fokina A.Yu. Heat and mass transfer in Fischer–Tropsch catalytic granule with localized cobalt microparticles. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2018, vol. 121, pp. 1335–1349. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.01.077>.
65. Donskoy I.G., Gross E.I. Numerical analysis of thermal ignition statistics in a stochastic reacting medium. *Inf. Mat. Tekh. Nauke Upr.*, 2024, no. 1, pp. 66–77. <https://doi.org/10.25729/ESI.2024.33.1.006>. (In Russian)
66. Derevich I.V., Klochov A.K. Thermal explosion of single particles in a random medium-temperature field. *High Temp.*, 2023, vol. 61, no. 1, pp. 98–107. <https://doi.org/10.1134/S0018151X23010030>.
67. Frank-Kamenetskii D.A. *Diffuziya i teploperedacha v khimicheskoi kinetike* [Diffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics]. Moscow, Nauka, 1987. 502 p. (In Russian)
68. Merzhanov A.G., Ozerkovskaya N.I., Shkadinskii K.G. Dynamics of thermal explosion in the postinduction period. *Combust., Explos. Shock Waves*, 1999, vol. 35, no. 6, pp. 660–665. <https://doi.org/10.1007/BF02674540>.
69. Barzykin V.V. Thermal explosion under linear heating. *Combust., Explos. Shock Waves*, 1973, vol. 9, no. 1, pp. 29–42. <https://doi.org/10.1007/BF00740358>.

70. Novozhilov V. Thermal explosion in oscillating ambient conditions. *Sci. Rep.*, 2016, vol. 6, no. 1, art. 29730. <https://doi.org/10.1038/srep29730>.
71. Fedotov S.P. Statistical model of the thermal ignition of a distributed system. *Combust. Flame*, 1992, vol. 91, no. 1, pp. 65–70. [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(92\)90127-B](https://doi.org/10.1016/0010-2180(92)90127-B).
72. Kloeden P.E., Platen E. *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations*. Ser.: Stochastic Modelling and Applied Probability. Vol. 23. Berlin, Heidelberg, Springer, 1992. xxxvi, 636 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-12616-5>.
73. Donskoy I. Thermal explosion problem with a stochastic boundary: Quasi-stationary approximation and direct numerical modelling. *Research Square*. Preprint, 2023. <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-3464165/v1>.
74. Takeno T. Ignition criterion by thermal explosion theory. *Combust. Flame*, 1977, vol. 29, pp. 209–211. [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(77\)90108-0](https://doi.org/10.1016/0010-2180(77)90108-0).
75. Wilke S., Schweitzer B., Khateeb S., Al-Hallaj S. Preventing thermal runaway propagation in lithium ion battery packs using a phase change composite material: An experimental study. *J. Power Sources*, 2017, vol. 340, pp. 51–59. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.11.018>.
76. Shahid S., Agelin-Chaab M. A review of thermal runaway prevention and mitigation strategies for lithium-ion batteries. *Energy Convers. Manage.: X*, 2022, vol. 16, art. 100310. <https://doi.org/10.1016/j.ecmx.2022.100310>.
77. Chen M., Sun Q., Li Y., Wu K., Liu B., Peng P., Wang Q. A thermal runaway simulation on a lithium titanate battery and the battery module. *Energies*, 2015, vol. 8, no. 1, pp. 490–500. <https://doi.org/10.3390/en8010490>.
78. Feng X., He X., Ouyang M., Wang L., Lu L., Ren D., Santhanagopalan S. A coupled electrochemical-thermal failure model for predicting the thermal runaway behavior of lithium-ion batteries. *J. Electrochem. Soc.*, 2018, vol. 165, no. 16, art. A3748. <https://doi.org/10.1149/2.0311816jes>.

Для цитирования: Донской И.Г. Численное моделирование характеристик за-
жигания цилиндрического тепловыделяющего образца в среде со случайными колеба-
ниями температуры // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2024. Т. 166,
кн. 3. С. 343–363. <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2024.3.343-363>.

For citation: Donskoy I.G. Numerical modeling of the ignition characteristics of a
cylindrical heat-generating sample in a medium with stochastic temperature variations.
Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki, 2024,
vol. 166, no. 3, pp. 343–363.
<https://doi.org/10.26907/2541-7746.2024.3.343-363>. (In Russian)