

Химические реакции, стохастическое горение

Этап №3

Саргсян А. Г. Тасыбаева Н. С. Алхатиб Осама Саинт-Амур Исмаэль Тазаева А.
А. Юсупов Ш. Ф.

2023 год

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

Цель проекта: на основе построения ансамбля частиц, в которых возможна мономолекулярная экзотермическая реакция, изучить принципы математического моделирования.

Задачи проекта:

1. Реализовать программу с алгоритмом расчета количества непрореагировавших молекул при нулевой теплопроводности вещества;
2. Реализовать программу с алгоритмом расчета количества непрореагировавших молекул при бесконечной теплопроводности вещества;
3. Смоделировать реакцию несколько раз, исследовать результаты при разных значениях;

Общая программная реализация

```
using Plots, DifferentialEquations
N0 = 10000    #изначальное количество молекул
Ea = 10^(-23) # энергия активации
k = 1.38*(10^(-23)) #постоянная Больцмана
T0 = 100 #температура вещества
ti=10 #характерное время перераспределения Энергии
u=-1/ti*exp(-Ea/(k*T0)) #скорость реакции
q=25000 #выделевшаяся теплота
c=14 #теплоемкость одной молекулы
#время моделирования
t0=0; tmax=150
t = range(t0,tmax, step=0.01)
```

Расчет количества непрореагировавших молекул при нулевой теплопроводности

```
function N(t)
    E=rand()*2*Ea
    if E>Ea
        return N0 * exp(u*t)
    else
        return N(t-0.001)
    end
end
plot(t, N,
    label="Количество непрореагировавших веществ",
    xlabel="время реакции",
    color=:red,
    xlim=[0,1.1*tmax], ylim=[0,1.1*N0])
```

Программная реализация при бесконечной теплопроводности вещества

```
function N1(t)
    T=T0+q*t/(N0*c)
    u1=-1/ti*exp(-Ea/(k*T))
    E=rand()*2*Ea
    if E>Ea
        return N0 * exp(u1*t)
    else
        return N1(t-0.05)
    end
end
plot(t, N1,
    label="Количество непрорегировавших веществ",
    xlabel="Время реакции",
    color=:green, xlim=[0,1.1*tmax], ylim=[0,1.1*N0])
```

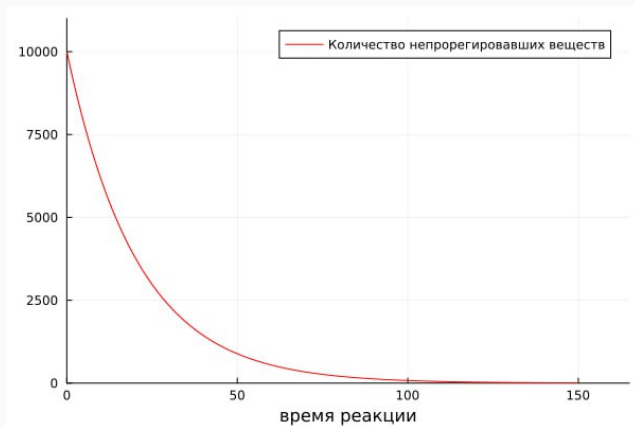


Рис. 1: случай нулевой теплопроводности

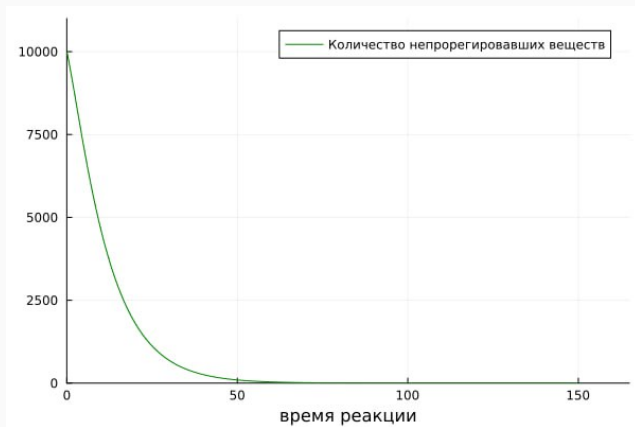


Рис. 2: случай бесконечной теплопроводности

На данном этапе нашего проекта мы реализовали программу решения задачи при случаях, когда вещество имеет нулевую теплопроводность, и при случае, когда теплопроводность бесконечная, а процесс адиабатический, а также смоделировали реакции при разных значениях.