

# Химические реакции, стохастическое горение

Этап №2

---

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. изучить теоретическую информацию об экзотермических реакциях
2. разработать алгоритмы, позволяющие:
  - смоделировать заданную реакцию;
  - исследовать случаи нулевой и бесконечной теплопроводности вещества на реакцию;
  - сравнить количество прореагировавшего вещества от температуры;
3. написать программу, воспользовавшись разработанными в процессе изучения задания алгоритмами;
4. проанализировать полученные результаты.

## Реакция при нулевой теплопроводности вещества

При нулевой теплопроводности вещества:

1. тепло остается там, где произошла реакция, и никак не влияет на реакцию других молекул;
2. реакция происходит при постоянной температуре непрореагировавших молекул  $T_0$ , следовательно изменение со временем их числа задается уравнением:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{-N}{\tau} * \exp\left(\frac{-E_a}{kT_0}\right) = -uN$$

## Реакция при нулевой теплопроводности вещества;

- Скорость химической реакции, приведенная к одной молекуле  $u = \frac{-1}{\tau} * \exp(\frac{-E_a}{kT_0})$  не зависит от времени;
- В этом случае решение уравнения хорошо известно  $N = N_0 \exp(-ut)$ ;
- Аналогичная ситуация происходит, если теплопроводность среды бесконечна, температура стенок постоянна и равна  $T_0$ ;

## Реакция при бесконечной теплопроводности вещества

Когда процесс адиабатический, и вещество имеет бесконечную теплопроводность, при реакции одной молекулы температура среды увеличивается на  $\Delta T = \frac{q}{N_0 c}$ . При этом случае решение сводится к системе уравнений

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = \frac{-N}{\tau} * \exp\left(\frac{-E_a}{kT_0}\right) \\ \frac{dT}{dt} = \frac{-q}{N_0 c} * \frac{dN}{dt} \end{cases}$$

## Реакция при бесконечной теплопроводности вещества

- Повышение температуры приводит к увеличению вероятности перехода для следующих молекул;
- При некоторых соотношениях  $E_a$ ,  $c$ ,  $q$  возможно явление теплового взрыва;
- При конечном числе частиц результаты моделирования могут отличаться от опыта к опыту;
- Отклонения средних значений от решения дифференциальных уравнений уменьшаются с ростом числа опытов  $n$  как  $1/\sqrt{n}$

На данном этапе нашего проекта мы рассмотрели алгоритмы решения задачи при случаях, когда вещество имеет нулевую теплопроводность, и при случае, когда теплопроводность бесконечная, а процесс адиабатический.