

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:

$$dN/dt = -N/\tau * \exp(-E_a/kT_0) = -uN$$

Реакция при нулевой теплопроводности вещества;

Скорость химической реакции, приведенная к одной молекуле $u = -1/\tau * \exp(-E_a/kT_0)$ не зависит от времени;

В этом случае решение уравнения хорошо известно $N = N_0 \exp(-ut)$;

То же самое 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 $\Delta T = q/N_0 c$. При этом случае решение сводится к системе уравнений

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

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.