

Мономолекулярная экзотермическая реакция

Алгоритмы

СОДЕРЖАНИЕ

1. **Общая модель
экзотермической реакции.**
Модель, которую можно
использовать в системах с
разными типами
теплопроводности

2. **Нулевая теплопроводность**
Модель применяется в
системе с нулевой
теплопроводностью.

3. **Бесконечная
теплопроводность**
Модель применяется в
системе с бесконечной
теплопроводностью.

4. **ОДУ**
Алгоритм решения системы
дифференциальных уравнений
для случая бесконечной
теплопроводности

Общая модель экзотермической реакции.

Эта модель описывает эволюцию числа активных молекул во времени.



Алгоритм

```
def run(N, T, temperature_function, max_time,
        activation_energy, characteristic_time):

    status = [False] * N
    n_time = [0] * int(max_time / characteristic_time)

    for t in range(len(n_time)):
        for i in range(0, N):
            if status[i] == True:
                continue

            e = random_energy(k, T)
            if e > activation_energy:
                T = temperature_function(T)
                status[i] = True
                n_time[t] = n_time[t] + 1

    return n_time
```

Начнем определять состояние всех частиц, если система неактивна.

Массив `n_time` - количество частиц, прореагировавших в момент времени `t` `i`].

На каждом шаге по времени для каждой молекулы вычисляется энергия текущего состояния активного атома E . Если $E > E_a$ реакция происходит, and the particle is marked a active.

Алгоритм возвращает количество прореагировавших молекул на каждом временном шаге.

Алгоритм с разными типами теплопроводности

0

Нулевая теплопроводность

тепло остается там, где произошла реакция, и никак не влияет на реакцию других молекул.

Реакция происходит при постоянной температуре непрореагировавших молекул T_0

```
def temperature(T):  
    return T
```

Алгоритм с разными типами теплопроводности



Бесконечная теплопроводность

выделившаяся энергия мгновенно перераспределяется между всеми молекулами (бесконечная теплопроводность), а стенки тепло не проводят (процесс адиабатический)

при реакции одной молекулы температура среды увеличивается на

$$\Delta T = \frac{q}{N_0 c}$$

Функцию можно определить следующим образом:

```
def temperature_f(T):  
    return T + q / (N * heat_capacity)
```

Функции Описывающие крайних случаев

В случае нулевой теплопроводности следующая функция описывает изменение N и T со временем их числа:

$$N = N_0 \exp(-ut), \quad u = \frac{u}{\tau} \exp\left(-\frac{E_a}{kT_0}\right)$$

В случае бесконечной теплопроводности Реакция описывается системой ДУ :

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{N}{\tau} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad \frac{dT}{dt} = -\frac{q}{N_0 c} \frac{dN}{dt}$$

Во втором случае, чтобы найти решение, мы должны использовать численные методы.

Решение системы дифференциальных уравнений

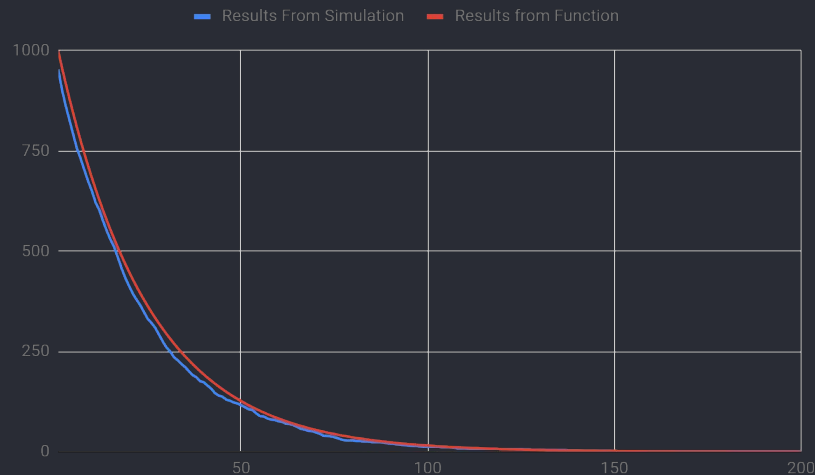
Чтобы найти решение системы, определяем ряды a и b . Эти ряды будут иметь значения N и T при времени t . Значения будут вычисляться по методу Эйлера:

$$a_0 = N_0, \quad a_t = \overbrace{-\frac{a_{t-1}}{\tau} \exp\left(-\frac{E_a}{kb_{t-1}}\right)}^{\text{rate of change}} h + a_{t-1}$$

$$b_0 = T_0, \quad b_t = \overbrace{-\frac{q}{N_0 c} a_t}^{\text{rate of change}} h + b_{t-1}$$

В конце вычислений мы можем найти приближение функций, интерполируя точки a и b по времени.

PREDICTED RESULTS



Этот график показывает результат нашей модели и функцию, описывающую процесс.