

Химические реакции, стохастическое горение

Этап №4

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

Задачи проекта

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

Задачи проекта:

1. Провести анализ проектной деятельности и её результатов;
2. Обсудить трудности, с которыми столкнулись во время выполнения проекта;
3. Выразить коллективное мнение относительно проведённой работы;
4. Сформулировать общие выводы проделанной работы;

Реакция при нулевой теплопроводности вещества

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

Результаты реакции

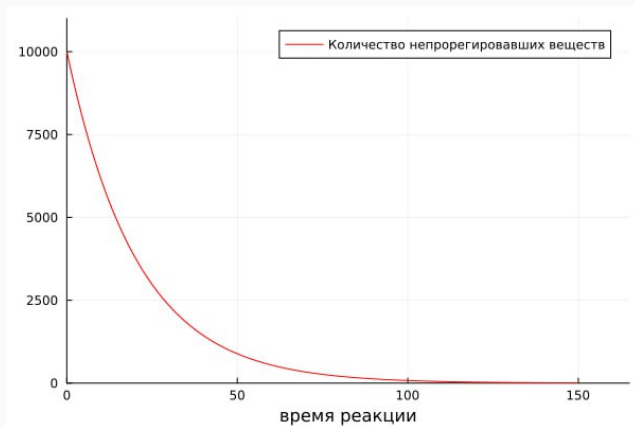


Рис. 1: Нулевая теплопроводность, первый эксперимент

Результаты реакции

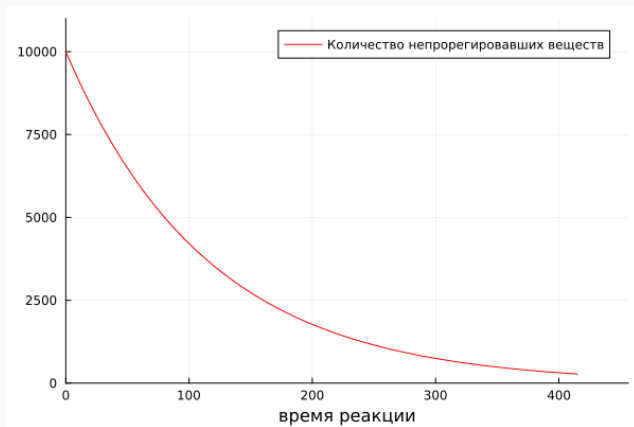


Рис. 2: Нулевая теплопроводность, второй эксперимент

Реакции при бесконечной теплопроводности вещества

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

Результаты реакции

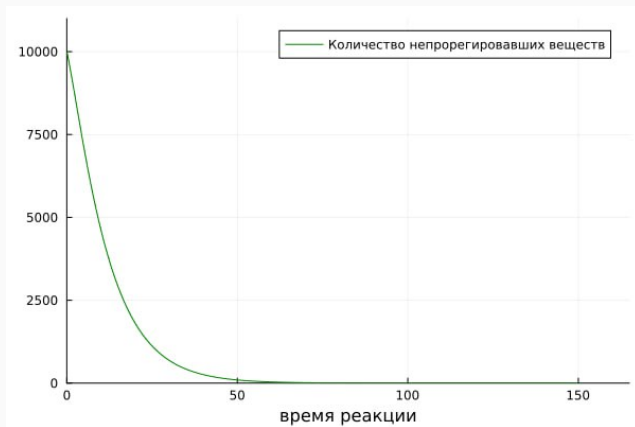


Рис. 3: Бесконечная теплопроводность, первый эксперимент

Результаты реакции

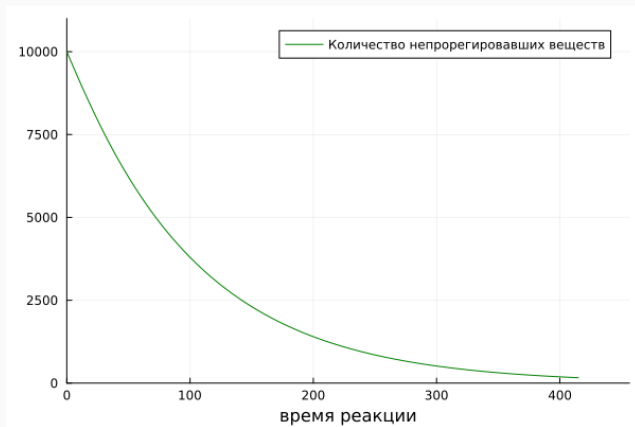


Рис. 4: Бесконечная теплопроводность, второй эксперимент

Изменение температуры

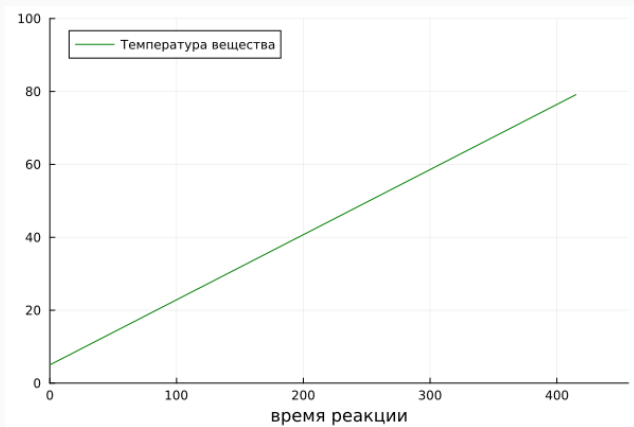


Рис. 5: Изменение температуры вещества

На данном проекте мы изучили мономолекулярные экзотермические реакции и их виды, смоделировали алгоритмы при случаях нулевой и бесконечной теплопроводности вещества, изучили скорость изменения температуры вещества во втором случае и его влияние на протекании реакции, пришли к мнению, что увеличение температуры уменьшает время протекания реакции.