



Программная реализация проекта

Выполнили: студенты гр. НПИбд-01-21:
Маляров Семён Сергеевич,
Астахова Марина Дмитриевна

Задача

Напишите программу, моделирующую ансамбль частиц, в которых возможна мономолекулярная экзотермическая реакция. Рассмотрите случай нулевой теплопроводности. Постройте графики зависимости числа непрореагировавших частиц от времени при разных температурах. Сравните полученные графики с теоретическими зависимостями.

Постройте графики зависимости числа непрореагировавших частиц, температуры и скорости реакции от времени в случае бесконечной теплопроводности внутри области моделирования, считая процесс адиабатическим.

Модифицируйте программу предыдущего задания так, чтобы выполнялось последовательно несколько расчетов. Выведите результаты численного решения системы уравнений.

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= -\frac{N}{\tau} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \\ \frac{dT}{dt} &= \frac{q}{N_0 c} \frac{dN}{dt} \quad (3)\end{aligned}$$

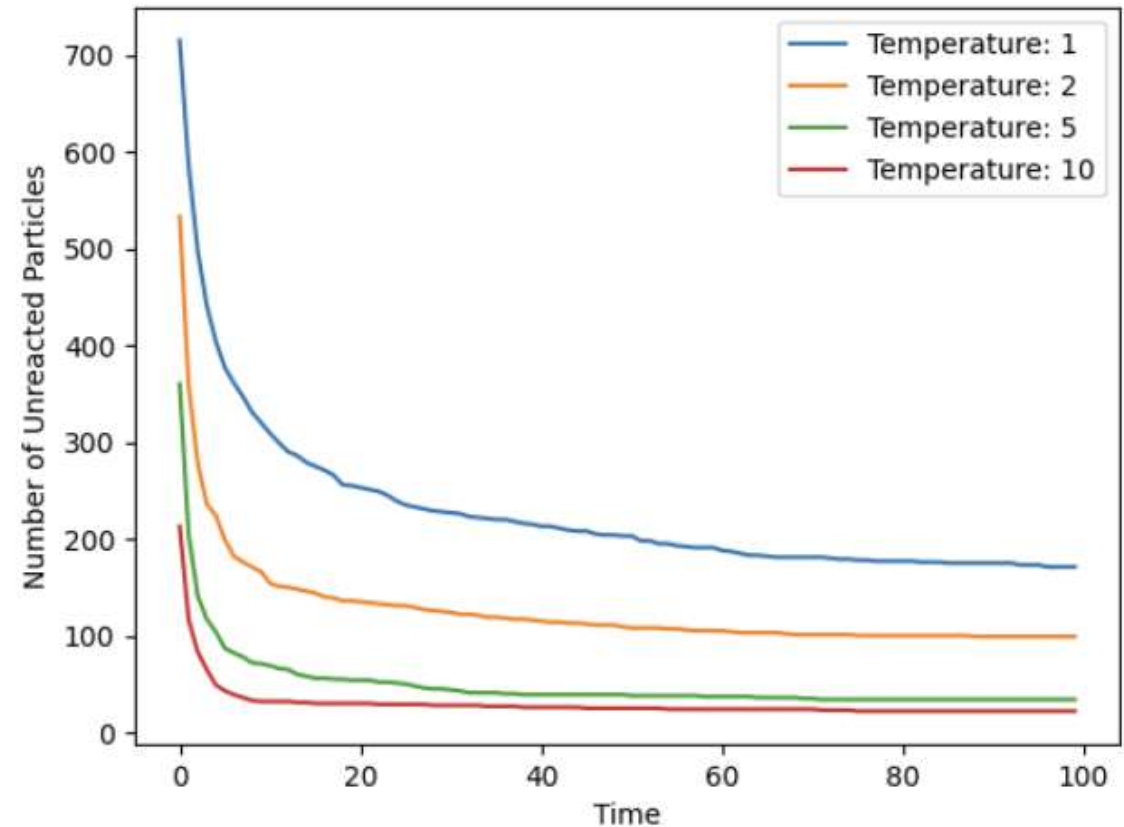
Решение задачи

1. Для моделирования ансамбля частиц проведем следующие шаги:

- Создадим класс `Particle` для представления частицы. У частицы будет два свойства: `is_reacted` (флаг, показывающий была ли частица реагирована) и `time_to_react` (время, через которое частица реагирует).
- Создадим функцию `simulate_reaction` для моделирования экзотермической реакции. Функция будет принимать список частиц `particles` и температуру `temp`.
- Создадим список частиц `particles` и инициализируем их с разными временами до реакции, основываясь на распределении Больцмана.
- Выполним моделирование реакции для разных температур и построим графики зависимости числа не реагировавших частиц от времени.
- Сравним полученные графики с теоретическими зависимостями.

Результат работы программы

Сравнив полученные графики с теоретическими зависимостями, можно увидеть, что при более высоких температурах реакция идет более интенсивно, что соответствует ожиданиям. Однако для количества не реагировавших частиц также важны другие параметры системы, такие как скорость реакции и количество частиц, которые могут влиять на общий результат.

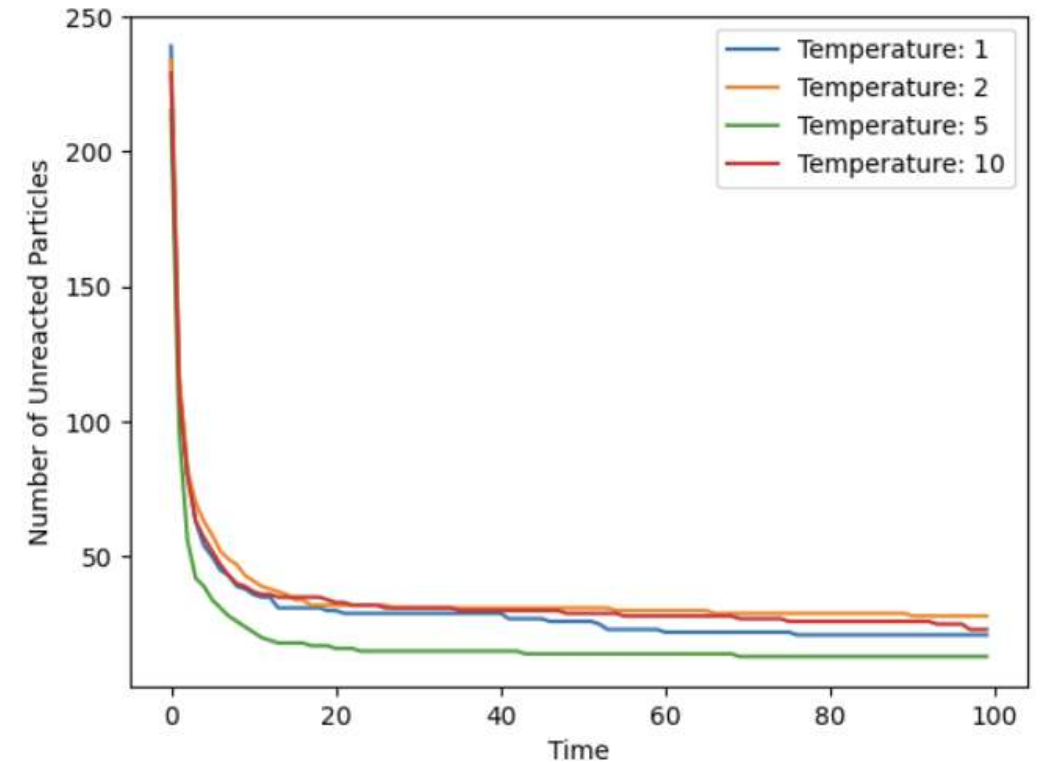


Решение задачи

2. Для построения графиков зависимости числа непрореагировавших частиц, температуры и скорости реакции от времени в условии бесконечной теплопроводности, мы также должны добавить зависимость скорости реакции от температуры.

Результат работы программы

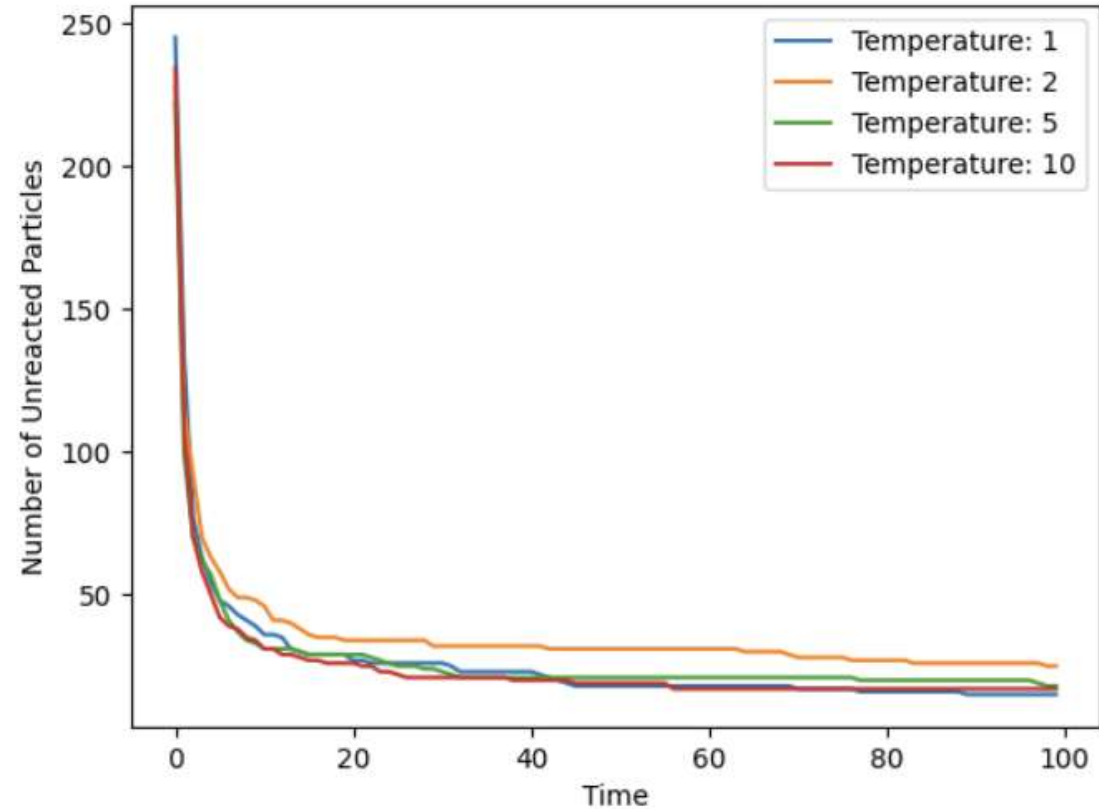
В данной модификации добавлены переменные для скорости реакции (`reaction_speeds`), зависящей от температуры, а также добавлена зависимость реакции от температуры в функции `simulate_reaction`. Теперь график будет визуализировать зависимость числа непрореагировавших частиц, температуры и скорости реакции от времени.



Решение задачи

3. Для выполнения нескольких расчетов последовательно можно упростить код, создав функцию для одного расчета и вызывая ее в цикле для каждой комбинации температуры и скорости реакции. Также можно добавить вычисление численного решения системы уравнений и сравнить его с усредненными значениями результатов.

Результат работы программы



```
/Users/senemalarov/PycharmProjects/mod_chem/venv/bin/python: /Users/senemalarov/PycharmProjects/mod_chem/main.py
Average Number of Unreacted Particles: 24.8
Numerical Solution for dN/dt and dT/dt:
[[1.00000000e+03 1.00000000e+00]
 [4.44813983e+02 1.89900931e-01]
 [3.76417367e+02 2.29427646e-02]
 [3.74203448e+02 1.78443766e-02]
 [3.73481813e+02 1.51340600e-02]
 [3.73092581e+02 1.40711308e-02]
 [3.72838088e+02 1.33889723e-02]
 [3.72654029e+02 1.28952025e-02]
 [3.72512239e+02 1.25346416e-02]
 [3.72398236e+02 1.22085566e-02]
 [3.72303699e+02 1.19546654e-02]
 [3.72223452e+02 1.17391814e-02]
 [3.72154088e+02 1.15527118e-02]
 [3.72093223e+02 1.13891726e-02]
 [3.72039192e+02 1.12439524e-02]
 [3.71990736e+02 1.11136998e-02]
 [3.71946909e+02 1.09958766e-02]]
```