

Химические реакции, стохастическое горение

Этап №1

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 реакцию горения;
 - исследовать влияние 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.

Смысл понятия «экзотермическая реакция»

Экзотермическая реакция — химическая реакция или ядерная реакция, сопровождающаяся выделением теплоты. По знаку тепловыделения противоположна эндотермической реакции — реакции с поглощением теплоты.



рис. 1 процесс реакции сварки рельсов

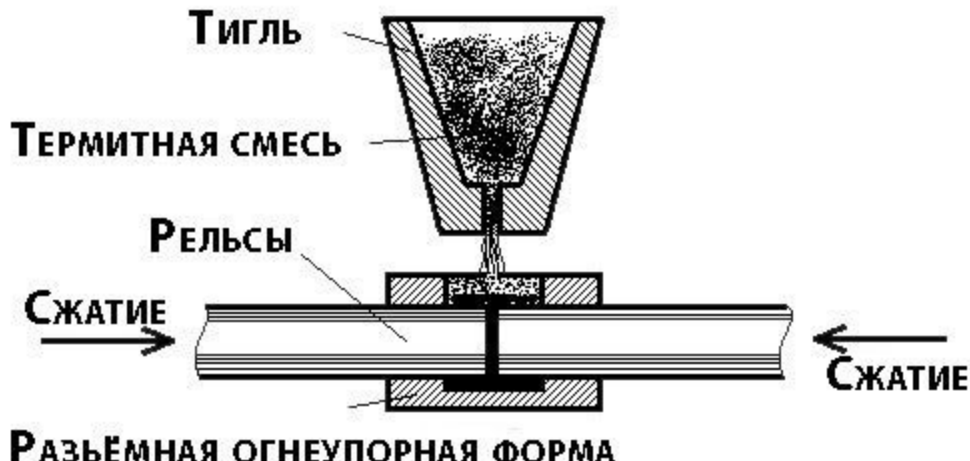


рис.2 Термитная сварка рельсов



Используемые физические величины

- E – энергия текущего состояния атома
- E_a - энергия активации
- k - постоянная Больцмана
- T - абсолютная температура, измеряемая в Кельвинах
- T_0 - постоянная температура непрореагировавших молекул
- c - теплоемкость одной молекулы
- N - количество молекул вещества
- u - скорость химической реакции, приведенная к одной молекуле
- N_0 - количество молекул вещества при температуре T_0

В работе мы рассмотрели мономолекулярную экзотермическую реакцию, что она из себя представляет и как она происходит. Так же мы познакомились с основными понятиями, которые используются при изучении и построении уравнений и моделей химических реакций.