

# Medžiagų maišymo modeliavimas cheminėse reakcijose

Modelling the mixing of reagents in chemical reactions

A. Vaicekauskas<sup>1</sup>

Darbo vadovas: Asist. Dr. R. Astrauskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Matematikos ir informatikos fakultetas  
Vilniaus Universitetas

2025

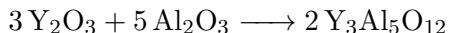
# Ytrio aluminio granatas (YAG)



pav. 1: Apdoroti YAG kristalai [1]

- Plačiausiai naudojama medžiaga lazerių aktyviosioms terpėms gaminti
- YAG lazeriai naudojami medicinos bei gamybos srityse

# YAG cheminė reakcija



- YAG kristalai sintezuojami kaitinant Aliuminio ir Itrio oksidų mišinį
- Reakcija gali užtrukti keliolika valandų
- Chemikai vykstant reakcijai periodiškai išmaišo reagentus, kad reakcijos laikas sutrumpėtų

# Darbo apimtis

**Tikslas** - sukurti kompiuterinį YAG reakcijos maišymo modelį ir jį ištirti.

## **Uždaviniai:**

- 1 Sukurti kompiuterinį YAG reakcijos modelį
- 2 Patikrinti kompiuterinio modelio rezultatų korektiškumą
- 3 Papildyti kompiuterinį modelį su maišymo procesu
- 4 Ištirti kompiuterinio modelio rezultatus

# Matematinis modelis

YAG Reakcijos–difuzijos sistema

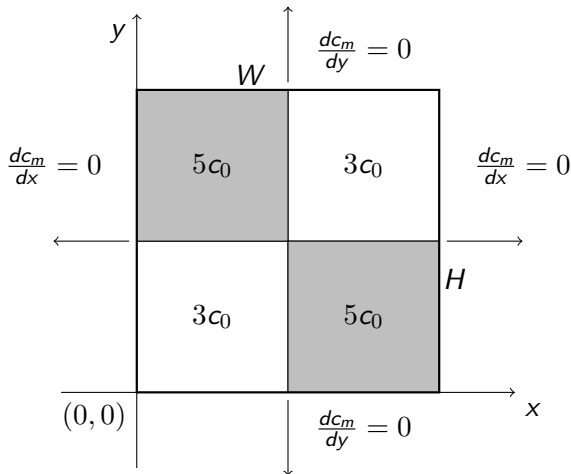
$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = -3kc_1c_2 + D \left( \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2} \right)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = -5kc_1c_2 + D \left( \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_2}{\partial y^2} \right)$$

$$\frac{\partial c_3}{\partial t} = 2kc_1c_2$$

$$(x, y, t) \in (0, W) \times (0, H) \times [0, T]$$

# Pradinės ir kraštinės sąlygos



pav. 2: Pradinės ir kraštinės sąlygos modeliui.

# Stabilumas

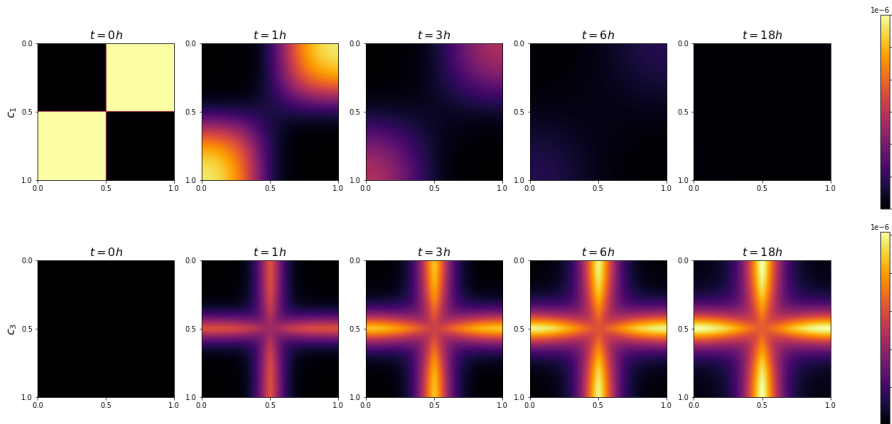
Galima parodyti, kad modelis bus stabilus tada, kai tenkinama ši nelygybė:

$$\Delta t \leqslant (15kc_0 + 2D((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}))^{-1}$$

Čia  $k$  - reakcijos greitis,  $D$  - difuzijos konstanta,  $\Delta x, \Delta y$  - diskretūs erdvės žingsniai,  $c_0$  - pradinių medžiagų koncentracijų didžiausias bendras daliklis.

# Reakcijos–difuzijos modelio rezultatai

Modelio evoliucija laike su pradinėmis ir kraštinėmis sąlygomis (2)



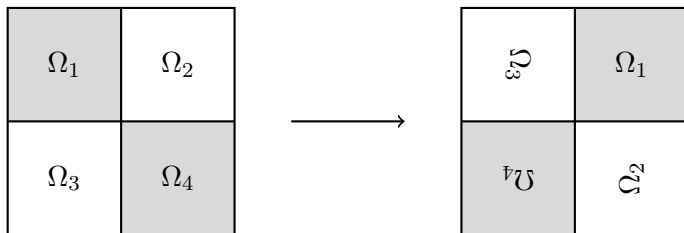


# Reakcijos stabdymo sąlyga

$$q(t_{\text{stop}}) = 0.03q(0)$$

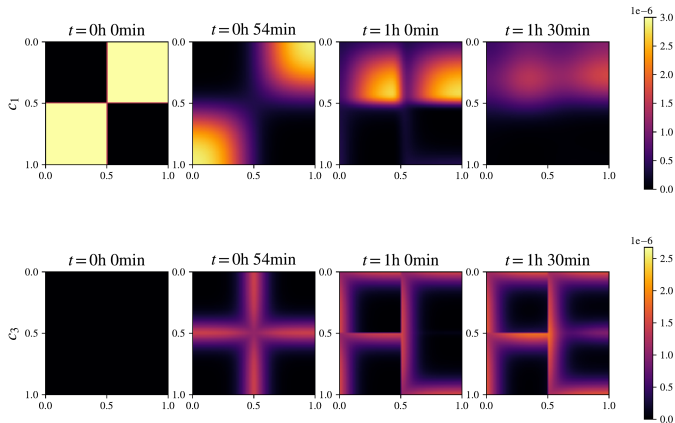
Čia  $q(t)$  yra pirmos ir antros medžiagų kiekis sistemoje. Reakcija stabdoma tada, kai pirmų dviejų medžiagų kiekis sistemoje pasiekia 3% pradinio kiekio.

# Atsitiktinis maišymas



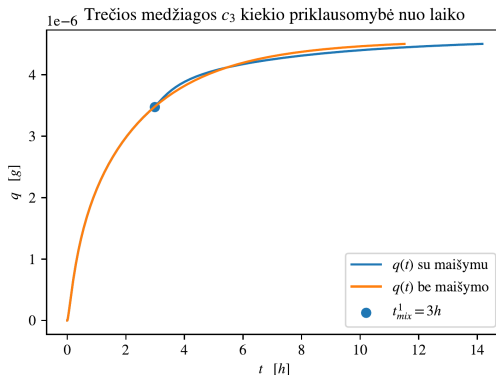
pav. 3: Atsitiktinio išmaišymo metu metu reakcijos erdvės sritys yra atsitiktinai pasukamos ir susikeičiamos vietomis.

# Atsitiktinio maišymo rezultatai



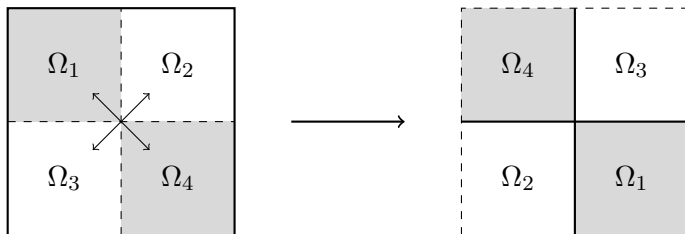
pav. 4: Modelio evoliucija laike su pradinėmis ir kraštinėmis sąlygomis (2), kai naudojamas atsitiktinio išmaišymo modelis (3).

# Atsitiktinio maišymo rezultatai



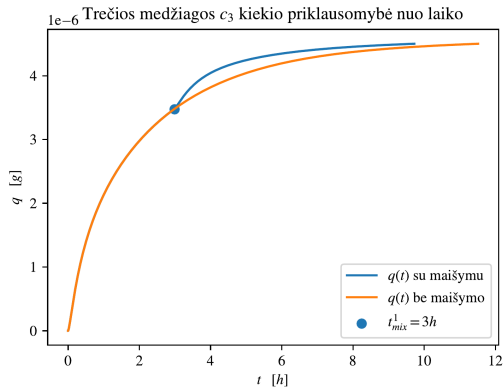
pav. 5: Atsitiktinio išmaišymo modelio (3) problema - gali ženkliai prailginti reakcijos pabaigos laiką. Tokio modelio poveiki reikia matuoti statistiniu bandymu arba pilnu perrinkimu.

# Tobulas maišymas



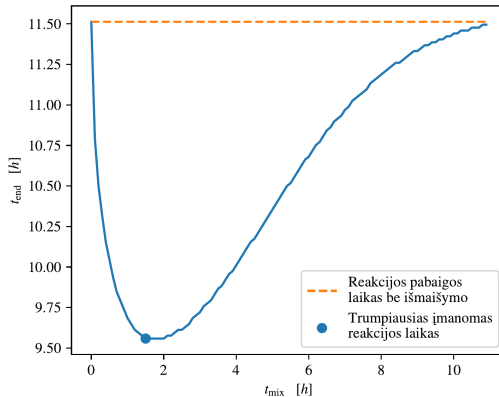
pav. 6: Tobulo išmaišymo metu metu reakcijos erdvės sritys yra susikeičiamos vietomis įstrižai, tokiu būdu reakcijos greitis padidėja daugiausiai.

# Tobulo maišymo rezultatai



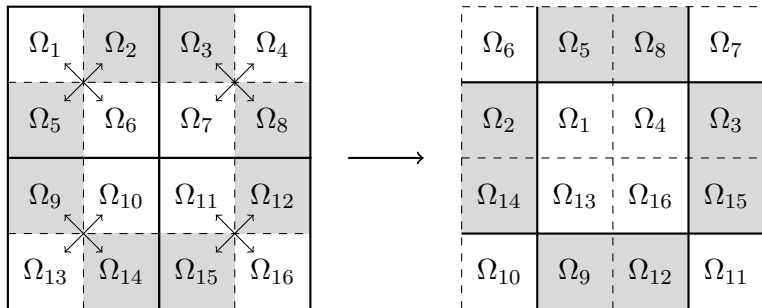
pav. 7: Tobulas maišymas deterministinis ir tikroviškiau atspindi išmaišymo pasekmes.

# Tobulo maišymo rezultatai



pav. 8: Reakcijos pabaigos laiko priklausomybė nuo išmaišymo laiko, kai naudojamas tobulo išmaišymo modelis (6).

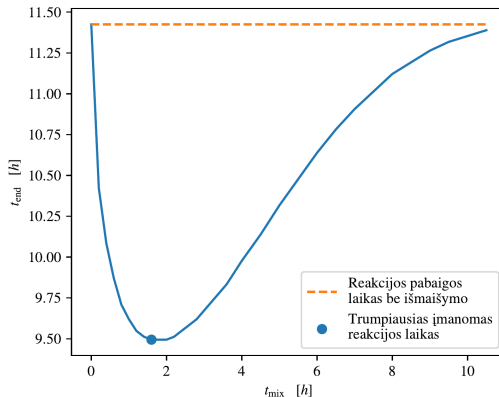
# Maišymas didesnėje erdvėje



pav. 9: Tobulo maišymo modelis didesnėje erdvėje analogiškas modeliui (6) atkartojant jį periodiškai.



# Maišymas didesnėje erdvėje



pav. 10: Reakcijos pabaigos laiko priklausomybė nuo išmaišymo laiko, kai naudojamas tobulo išmaišymo modelis didesnėje erdvėje (9).

# Rezultatai

- Sukurtas kompiuterinis YAG reakcijos modelis.
- Teoriškai parodyta skaitinio modelio stabilumo sąlyga
- Kompiuterinio modelio rezultatai buvo analizuojami ir buvo užtikrinta, kad modelis veikia korektiškai
- Pasiūlyti du maišymo modeliai - atsitiktinis ir tobulas
- Išmaišymo modeliai integruoti į kompiuterinį YAG reakcijos modelį
- Atlikta papildyto kompiuterinio modelio rezultatų analizė

# Išvados

- Atsitiktinio maišymo modelio rezultatai neatitinka realybėje pastebimų rezultatų, kai reakcija modeliuojama mažoje srityje, kurioje susiduria tik 4-ios mikrodalelės. Norint iš šio modelio išgauti tikrovę atitinkančius rezultatus yra būtina modeliuoti didesnę erdvės sritį.
- Tobulo išmaišymo modelio rezultatai atitinka realybėje pastebimą reakcijos pagreitėjimą.
- Modeliuojant didesnę erdvės sritį, tobulo išmaišymo modelio rezultatai kinta gana nežymiai, todėl maišymo modeliavimui užtenka modeliuoti mažą reakcijos erdvės sritį su 4-iom skirtingų medžiagų mikrodalelėmis

# Literatūros šaltiniai

- [1] *Nd:YAG Crystals for Solid-State Lasers – Eksma Optics*. URL: <https://eksmaoptics.com/nonlinear-and-laser-crystals/laser-crystals/nd-yag-crystals/> (tikrinta 2025 01 19).