

Medžiagų maišymo modeliavimas cheminėse reakcijose

Modelling the mixing of reagents in chemical reactions

A. Vaicekauskas¹

Darbo vadovas: Asist. Dr. R. Astrauskas¹

¹Matematikos ir informatikos fakultetas
Vilniaus Universitetas

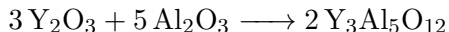
2025

Ytrio aluminio granatas (YAG)



- 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

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

Uždaviniai:

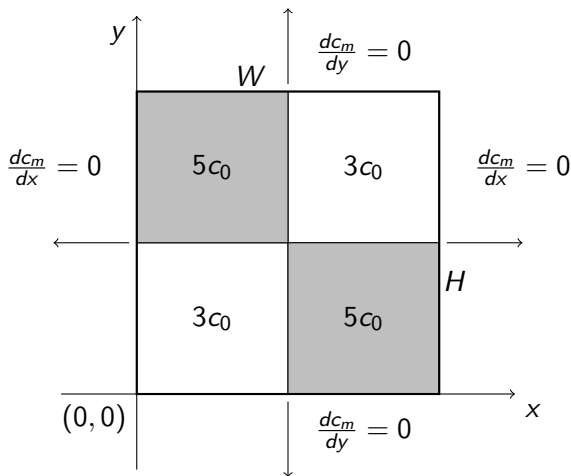
- 1 Sukurti kompiuterinį YAG reakcijos modelį
- 2 Patikrinti kompiuterinio modelio rezultatų korektiškumą
- 3 Papildyti kompiuterinį modelį su maišymo procesu
- 4 Ištirti kompiuterinio modelio rezultatus

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

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

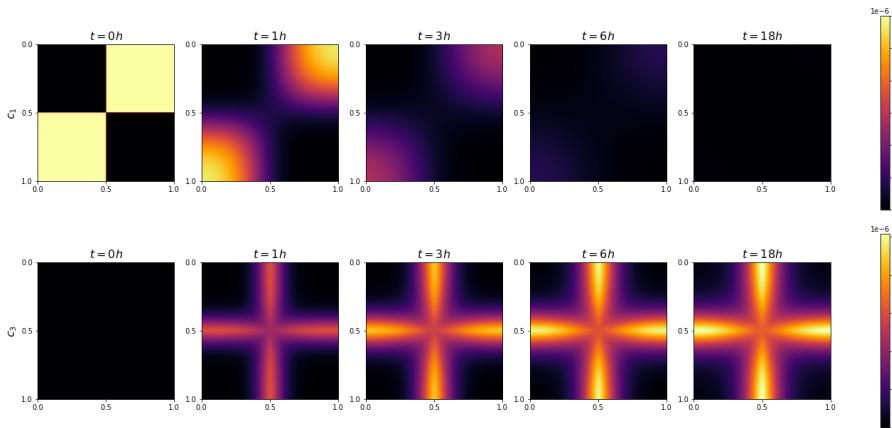
$$\frac{\partial c_3}{\partial t} = 2kc_1c_2$$

Pradinės ir kraštinės sąlygos

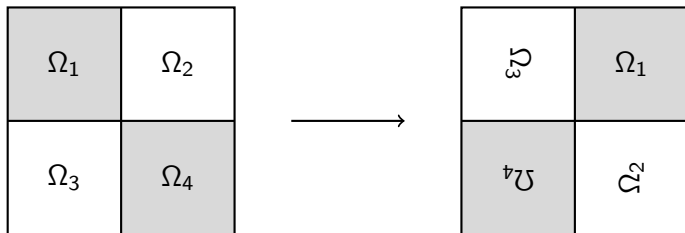


$$\Delta t \leqslant (15kc_0 + 2D((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}))^{-1}$$

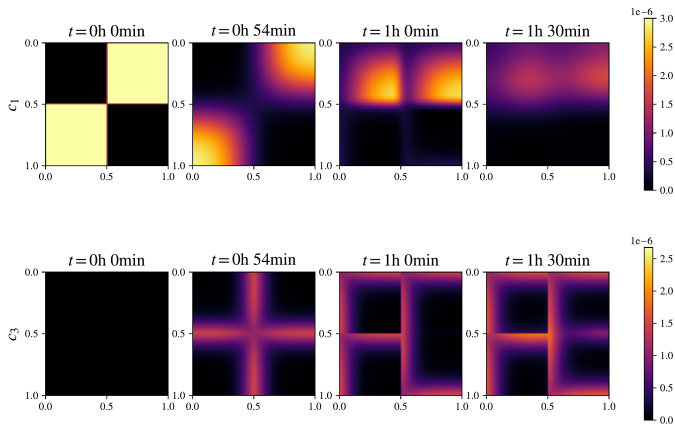
Reakcijos modelio rezultatai



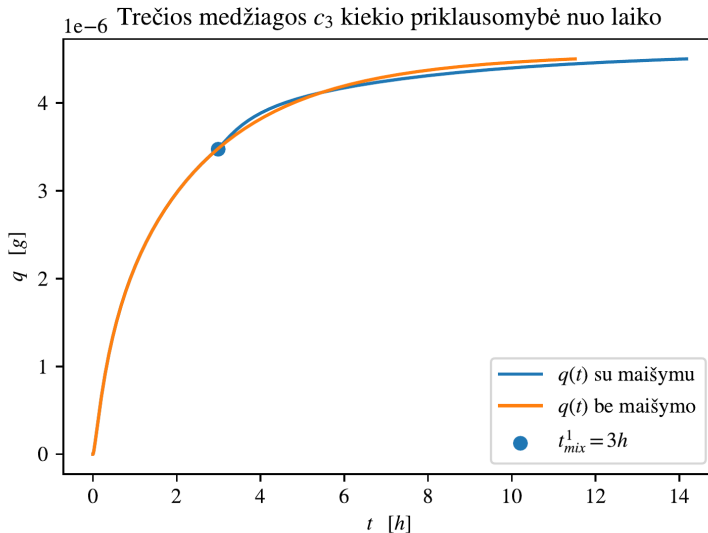
Atsitiktinis maišymas



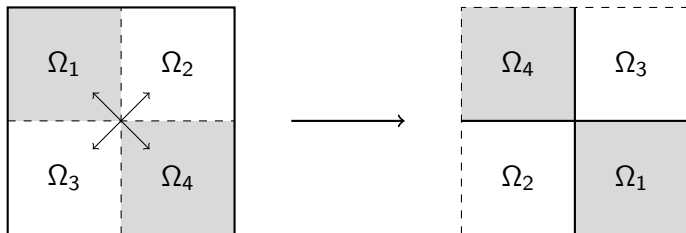
Atsitiktinio maišymo rezultatai



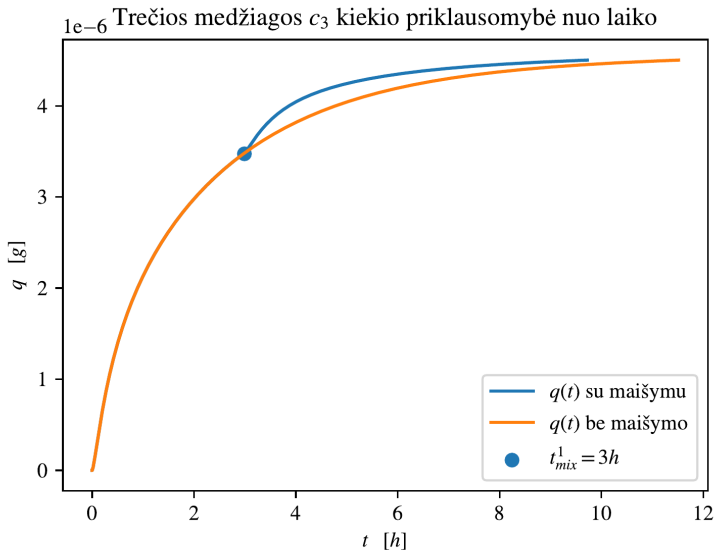
Atsitiktinio maišymo rezultatai



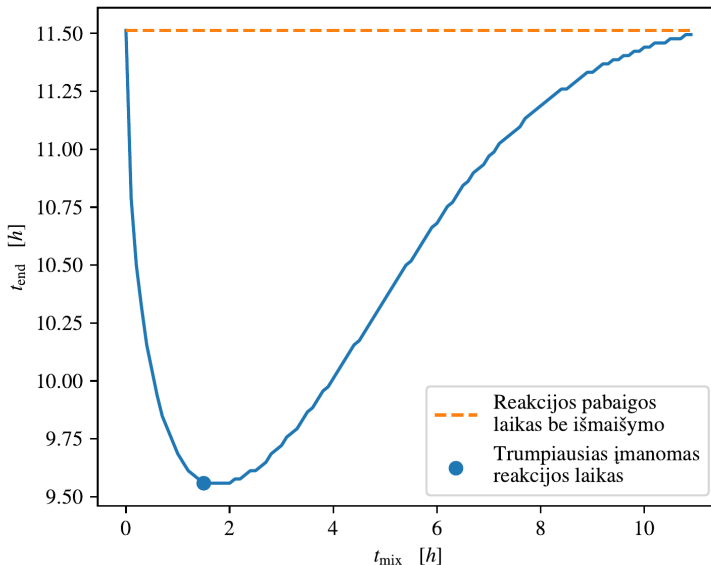
Tobulas Maišymas



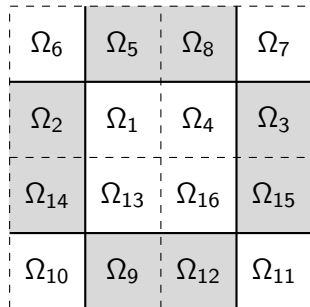
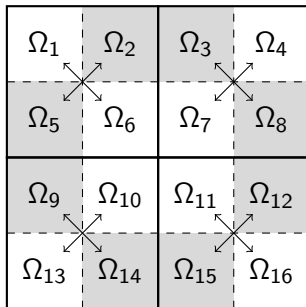
Tobulo maišymo rezultatai



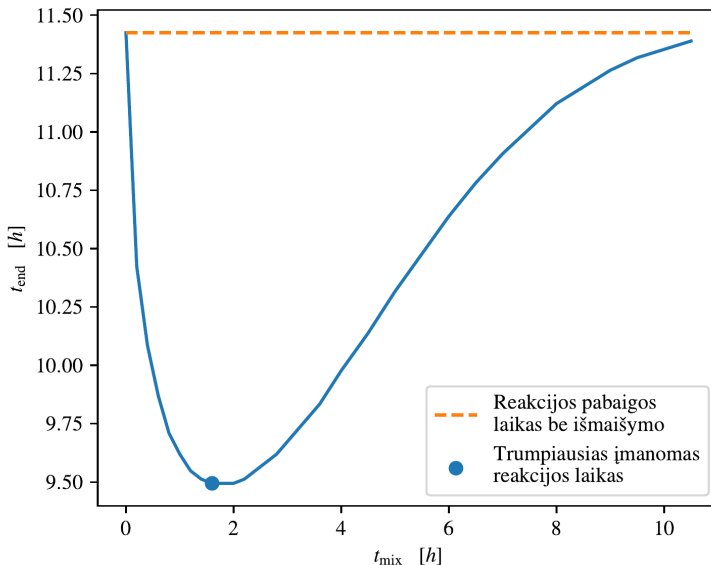
Tobulo maišymo rezultatai



Maišymas didesnėje erdvėje



Maišymas didesnėje erdvėje



- 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