

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)

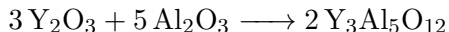


slides/assets/nd:yag.png

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

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

YAG Reakcijos–difuzijos sistema

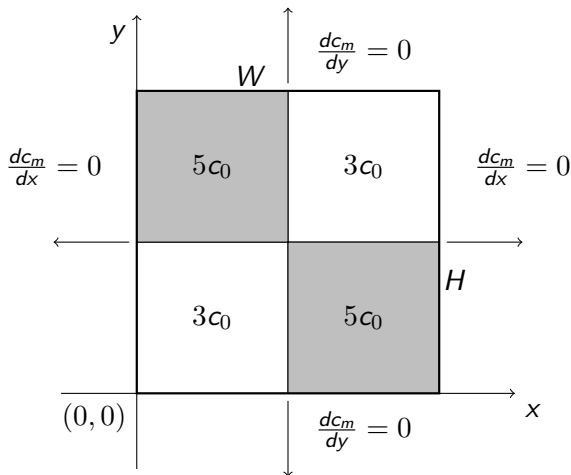
$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = -3kc_1c_2 + D \left(\frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2} \right)$$

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

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

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

Pradinės ir kraštinės sąlygos



pav. 2: Pradinės ir kraštinės sąlygos modeliui.

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

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

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)

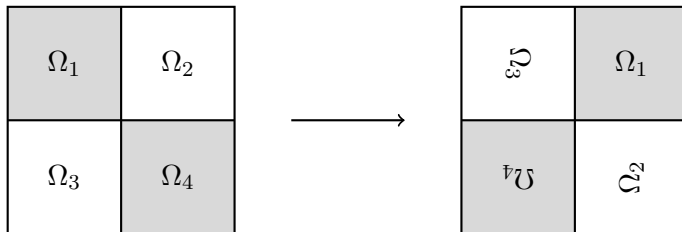
`paper/assets/example-0.png`

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

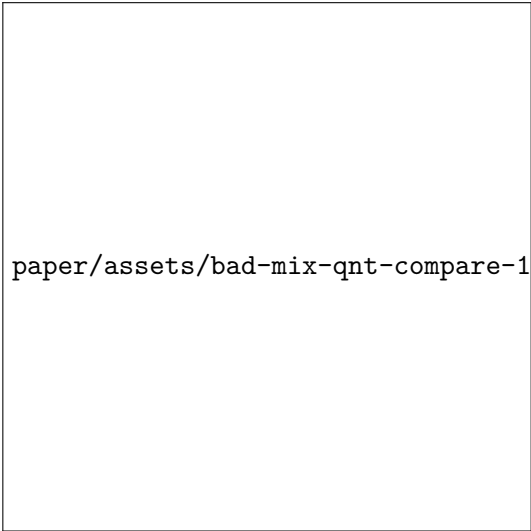


pav. 3: Atsitiktinio išmaišymo metu metu reakcijos erdvės sritys yra atsitiktinai pasukamos ir susikeičiamos vietomis.

Atsitiktinio maišymo rezultatai

`paper/assets/random-mix-example-c0-1.png`

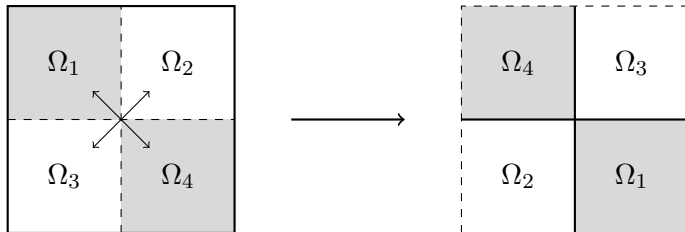
Atsitiktinio maišymo rezultatai



paper/assets/bad-mix-qnt-compare-1.png

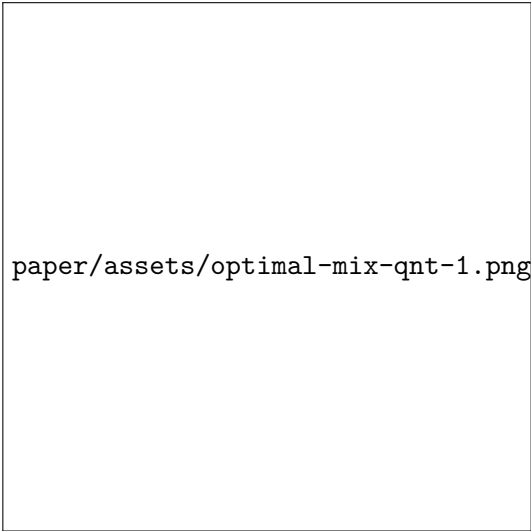
pav. 5: Atsitiktinio išmaišymo modelio (3) problema - gali ženkliai prailginti reakcijos pabaigos laiką. Tokio modelio poveikį reikia matuoti

Tobulas maišymas



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

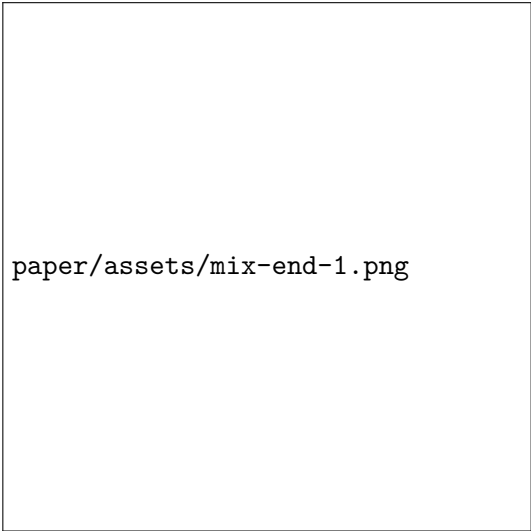
Tobulo maišymo rezultatai



`paper/assets/optimal-mix-qnt-1.png`

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

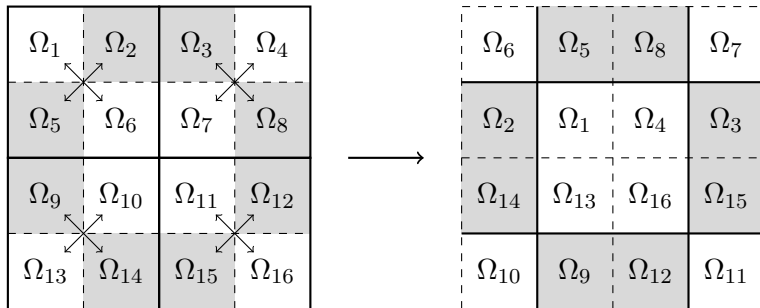
Tobulo maišymo rezultatai



`paper/assets/mix-end-1.png`

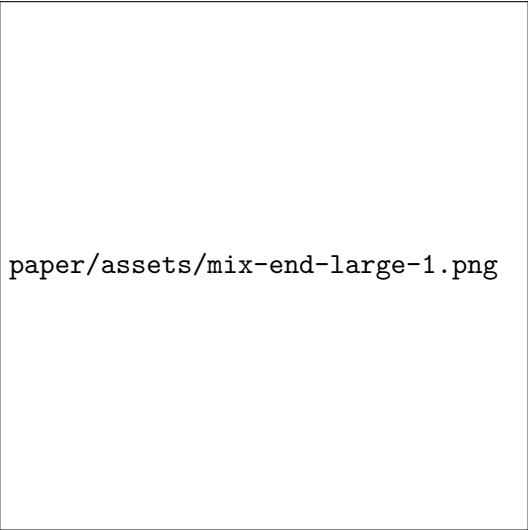
pav. 8: Reakcijos pabaigos laiko priklausomybė nuo išmaišymo laiko, kai naudojamas tobulo išmaišymo modelis (6).

Maišymas didesnėje erdvėje



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

Maišymas didesnėje erdvėje



paper/assets/mix-end-large-1.png

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

- 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

- 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

- [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).