VILNIAUS UNIVERSITETAS
MATEMATIKOS IR INFORMATIKOS FAKULTETAS
INFORMATIKOS INSTITUTAS
PROGRAMŲ SISTEMŲ KATEDRA

Kursinis darbas

Medžiagų maišymo modeliavimas cheminėse reakcijose

(Modelling the mixing of reagents in chemical reactions)

Atliko: 4 kurso 3 grupės studentas
Arnas Vaicekauskas (parašas)

Darbo vadovas:
Asist. Dr. Rokas Astrauskas (parašas)

Vilnius
2024

Turinys

Sąvokų apibrėžimai

Įvadas

Šio **darbo tikslas** yra patobulinti egzistuojantį matematinį itrio aliuminio granato (YAG) reakcijos modelį [IKL05] įtraukiant medžiagų maišymo procesą.

Iškelti darbo uždaviniai:

1. Atlikti literatūros analizę difuzijos modelių, YAG sintezės modelių ir baigtinių skirtumų metodų temomis
2. Sudaryti dviejų dimensijų skaitinį YAG medžiagos reakcijos modelį Dekarto koordinačių sistemoje
3. Sudaryti kompiuterinį modelį pagal skaitinį modelį
4. Patikrinti kompiuterinio modelio teisingumą ir palyginti gautus rezultatus su eksperimentiniais
5. Sukurti skaitinį medžiagų maišymo proceso modelį
6. Papildyti kompiuterinį modelį išmaišymo procesu
7. Ištirti reakcijos pabaigos laiko priklausomybę nuo išmaišymo laiko (čia gal būtų galima tirti kažką bendresnio)

1. Matematinis modelis

1.1. Bedimensis modelis

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = -3c_1c_2 + D\Delta c_1 \tag{1a}$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = -5c_1c_2 + D\Delta c_2 \tag{1b}$$

$$\frac{\partial c_3}{\partial t} = 2c_1c_2 \tag{1c}$$

kur c_1,c_2,c_3 yra bedimensė medžiagų koncentracija, Δ - Laplaso operatorius, t - laikas, D - bedimensis medžiagų c_1 ir c_2 difuzijos koeficientas.

1.2. Elementų maišymasis dviejose dimensijose

Interpretavus bedimensį modelį (1) dviejose dimensijose gauname lygtis

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = -3c_1c_2 + D\left(\frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2}\right) \tag{2a}$$

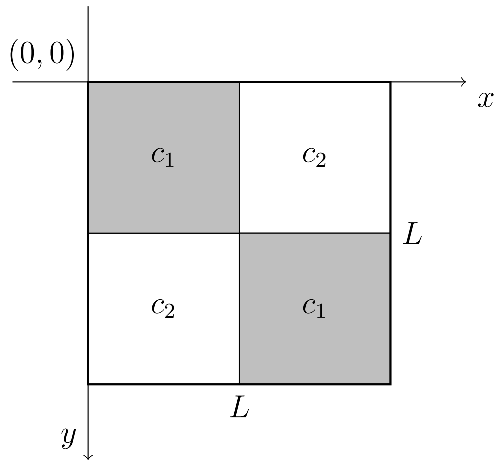
$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = -5c_1c_2 + D\left(\frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_2}{\partial y^2}\right) \tag{2b}$$

$$\frac{\partial c_3}{\partial t} = 2c_1c_2 \tag{2c}$$

Šiam modeliui yra taikomos šios pradinės ir kraštinės sąlygos:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial c_1}{\partial x}\Big|_{x=0} = \frac{\partial c_1}{\partial x}\Big|_{x=L} = \frac{\partial c_2}{\partial x}\Big|_{x=0} = \frac{\partial c_2}{\partial x}\Big|_{x=L} = 0, && y \in [0,L], t \in [0,T]\\
&\frac{\partial c_1}{\partial y}\Big|_{y=0} = \frac{\partial c_1}{\partial y}\Big|_{y=L} = \frac{\partial c_2}{\partial y}\Big|_{y=0} = \frac{\partial c_2}{\partial y}\Big|_{y=L} = 0, && x \in [0,L], t \in [0,T]\\
&c_1(x,y,0) = \begin{cases} 1, \text{jei } x \in A \\ 0, \text{kitaip} \end{cases} \quad c_2(x,y,0) = \begin{cases} 1, \text{jei } x \notin A \\ 0, \text{kitaip} \end{cases}, && (x,y) \in [0,L]^2, A = \left[0,\tfrac{L}{2}\right]^2 \cup \left[\tfrac{L}{2},L\right]^2\\
&c_3(x,y,0) = 0, && (x,y) \in [0,L]^2,
\end{aligned}$$

kur L - bedimensis kubo kraštinės ilgis, T - bedimensė proceso trukmė.

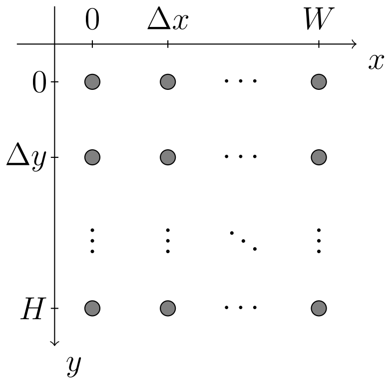


1 pav. Dvimačio modelio pradinės sąlygos laiku $t = 0$. Pilka spalva žymi plotą priklausantį aibei A.

2. Skaitinis modelis

2.1. Erdvės diskretizavimas Dekarto koordinačių sistemoje

Dviejų dimensijų skaitiniam modeliui erdvė buvo padalinta į $N \times M$ taškų nutolusių vienas nuo kito fiksuotais Δx ir Δy atstumais.



2 pav. diskretizuota erdvė

Čia

2.2. Dviejų dimensijų skaitinis modelis Dekarto koordinačių sistemoje

Remiantis išreikštiniu baigtinių skirtumų metodu iš dvimačio modelio galima gauti skaitinį modelį.

$$\begin{aligned}
\frac{c_{1,i,j}^{n+1} - c_{1,i,j}^{n}}{\Delta t} &= -3c_{1,i,j}^{n}c_{2,i,j}^{n} \\
&+ D\left(\frac{c_{1,i-1,j}^{n} - 2c_{1,i,j}^{n} + c_{1,i+1,j}^{n}}{(\Delta x)^2} + \frac{c_{1,i,j-1}^{n} - 2c_{1,i,j}^{n} + c_{1,i,j+1}^{n}}{(\Delta y)^2}\right) && \text{(3a)} \\
\frac{c_{2,i,j}^{n+1} - c_{2,i,j}^{n}}{\Delta t} &= -5c_{1,i,j}^{n}c_{2,i,j}^{n} \\
&+ D\left(\frac{c_{2,i-1,j}^{n} - 2c_{2,i,j}^{n} + c_{2,i+1,j}^{n}}{(\Delta x)^2} + \frac{c_{2,i,j-1}^{n} - 2c_{2,i,j}^{n} + c_{2,i,j+1}^{n}}{(\Delta y)^2}\right) && \text{(3b)} \\
\frac{c_{3,i,j}^{n+1} - c_{3,i,j}^{n}}{\Delta t} &= 2c_{1,i,j}^{n}c_{2,i,j}^{n}, && \text{(3c)}
\end{aligned}$$

kur $n \in [0, T)$ - laiko momentas, $i \in [0,N)$ - diskrečios erdvės taško koordinatė x ašyje, $j \in [0,M)$ - diskrečios erdvės taško koordinatė y ašyje, $c_{1,i,j}^{n}$ - pirmos medžiagos kiekis diskrečios erdvės taške i, j laiko momentu n, $c_{2,i,j}^{n}$ - antros medžiagos kiekis diskrečios erdvės taške i, j laiko momentu n, $c_{3,i,j}^{n}$ - trečios medžiagos kiekis diskrečios erdvės taške i, j laiko momentu n, Δt - laiko žingsnis, Δx - diskrečios erdvės žingsnis x ašimi, Δy - diskrečios erdvės žingsnis y ašimi.

2.2.1. Laiko žingsnio pasirinkimas

Pertvarkius skaitinio modelio lygtis (3) taip, kad kairėje lygties pusėje liktų medžiagos kiekis sekančiu laiko momentu ir sugrupavus pastovius narius pagal medžiagos kiekio praėjusį laiko momentą gauname išraiška koeficiento, kuris nusako kiek medžiagos ląstelėje i,j persikels į sekantį laiko momentą.

$$\begin{aligned} c_{1,i,j}^{n+1} &= \left(1 - \Delta t \left(3c_{2,i,j}^{n} + 2D\left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2}\right)\right)\right) c_{1,i,j}^{n} \\ &\quad + D\Delta t \left(\frac{c_{1,i-1,j}^{n} + c_{1,i+1,j}^{n}}{(\Delta x)^2} + \frac{c_{1,i,j-1}^{n} + c_{1,i,j+1}^{n}}{(\Delta y)^2}\right) \qquad \text{(4a)} \\ c_{2,i,j}^{n+1} &= \left(1 - \Delta t \left(5c_{1,i,j}^{n} + 2D\left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2}\right)\right)\right) c_{2,i,j}^{n} \\ &\quad + D\Delta t \left(\frac{c_{2,i-1,j}^{n} + c_{2,i+1,j}^{n}}{(\Delta x)^2} + \frac{c_{2,i,j-1}^{n} + c_{2,i,j+1}^{n}}{(\Delta y)^2}\right) \qquad \text{(4b)} \\ c_{3,i,j}^{n+1} &= c_{3,i,j}^{n} + 2\Delta t c_{1,i,j}^{n} c_{2,i,j}^{n} \qquad \text{(4c)} \end{aligned}$$

Norint užtikrinti modelio skaitmeninį reikia pasirinkti tokį laiko žingsnį Δt, kad koeficientai būtų neneigiami. Trečioje lygtyje medžiagos kiekio koeficientas nepriklauso nuo laiko žingsnio Δt, todėl turime dvi nelygybes, kurias galime išreikšti per laiko žingsnį Δt.

$$\begin{aligned} 1 - \Delta t \left(3c_{2,i,j}^{n} + 2D\left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2}\right)\right) \geq 0 &\implies \Delta t \leq \frac{1}{3c_{2,i,j}^{n} + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)} \\ 1 - \Delta t \left(5c_{1,i,j}^{n} + 2D\left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2}\right)\right) \geq 0 &\implies \Delta t \leq \frac{1}{5c_{1,i,j}^{n} + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)} \end{aligned}$$

Galima panaikinti laiko žingsnio Δt priklausomybę nuo einamojo diskrečios erdvės taško padarius pastebėjimą, kad laiko žingsnis su didžiausiomis medžiagų kiekių $c_{1,i,j}^n$ bei $c_{2,i,j}^n$ reikšmėmis užtikrintų stabilumą visiem likusiems diskrečios erdvės taškams, taigi:

$$\Delta t \leq \min\left(\frac{1}{3\max\limits_{(i,j,n)\in[0,N)\times[0,M)\times[0,T)} c_{2,i,j}^n + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)},\right.$$
$$\left.\frac{1}{5\max\limits_{(i,j,n)\in[0,N)\times[0,M)\times[0,T)} c_{1,i,j}^n + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)}\right)$$

Taip pat galime atsikratyti laiko žingsnio Δt priklausomybės nuo einamojo laiko momento, nes pagal duotas kraštines sąlygas į sistemą laikui einant nepatenka joks naujas medžiagų c_1 ir c_2 kiekis. Taip pat vykstant medžiagų c_1 ir c_2 reakcijai, bendri šių medžiagų kiekiai uždaroje sistemoje mažės, todėl:

$$\Delta t \leq \min\left(\frac{1}{3\max\limits_{(i,j)\in[0,N)\times[0,M)} c_{2,i,j}^0 + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)},\right.$$
$$\left.\frac{1}{5\max\limits_{(i,j)\in[0,N)\times[0,M)} c_{1,i,j}^0 + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)}\right)$$

Šiuo atveju, iš pradinių sąlygų $\max\limits_{(i,j)\in[0,N)\times[0,M)} c_{2,i,j}^0 = \max\limits_{(i,j)\in[0,N)\times[0,M)} c_{1,i,j}^0 = 1$, taigi

$$\Delta t \leq \frac{1}{5 + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)}$$

Rezultatai ir išvados

Literatūra

[IKL05] Feliksas Ivanauskas, Aivaras Kareiva, and Bogdanas Lapcun. On the modelling of solid state reactions.Synthesis of YAG. *Journal of Mathematical Chemistry*, 37(4):365–376, 2005-05-01. ISSN: 1572-8897. DOI: 10.1007/s10910-004-1103-2. URL: https://doi.org/10.1007/s10910-004-1103-2 (visited on 2024-10-20).