

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	2
Ivadas	3
1. Skaitinis modelis	4
1.1. Erdvės diskretizavimas Dekarto koordinačių sistemoje	4
1.2. Dviejų dimensijų skaitinis modelis Dekarto koordinačių sistemoje	4
Rezultatai ir išvados	5
Literatūra	6

Sąvokų apibrėžimai

Įvadas

Šio **darbo tikslas** yra patobulinti egzistuojantį matematinį itrio aliuminio granato (YAG) reakcijos modelį [MIK⁺12] įtraukiant medžiagų maišymo procesą.

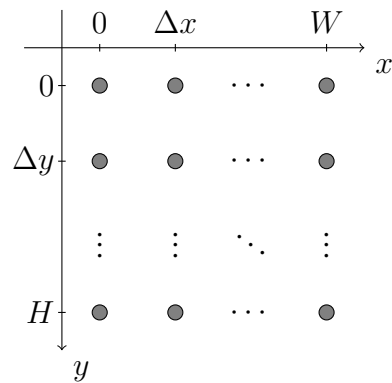
Iškelti darbo uždaviniai:

1. Sudaryti dviejų dimensijų skaitinį YAG medžiagos reakcijos modelį Dekarto koordinatų sistemoje
2. Sudaryti kompiuterinį modelį pagal skaitinį modelį
3. Patikrinti kompiuterinio modelio teisingumą ir palyginti gautus rezultatus su eksperimentiniais
4. Sukurti skaitinį medžiagų maišymo proceso modelį
5. Papildyti kompiuterinį modelį išmaišymo procesu
6. Ištirti reakcijos pabaigos laiko priklausomybę nuo išmaišymo laiko

1. Skaitinis modelis

1.1. Erdvės diskretizavimas Dekarto koordinatų sistemoje

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



1 pav. diskretizuota erdvė

1.2. Dviejų dimensijų skaitinis modelis Dekarto koordinatų sistemoje

Rezultatai ir išvados

Literatūra

- [MIK⁺12] Mažvydas Mackevičius, Feliksas Ivanauskas, Aivaras Kareiva, and Darius Jasaitis. A closer look at the computer modeling and sintering optimization in the preparation of YAG. *Journal of Mathematical Chemistry*, 50(8):2291–2302, 2012-09. ISSN: 1572-8897. DOI: 10.1007/s10910-012-0031-9. (Visited on 2024-10-17).