

SEMINARAS

2018 lapkričio 13 d. 09:00, SRL-I 427

Raimondas Čiegis

Neklasikinių kinetinių reakcijų, vykstančių ant katalizatoriaus paviršiaus, skaitinis modeliavimas.

Dinaminiai modeliai, aprašantys kinetines reakcijas katalizatoriaus paviršiuje, yra labai sudėtingi. Modeliuojame svarbiausias reakcijas, vykstančias tarp skirtingų komponentų, joms būdingi skirtingi reakcijų greičiai ir netiesinės sąveikos tipai. Ši modelio dalis aprašoma standžiųjų netiesinių paprastųjų diferencialinių lygčių sistemomis.

Reaguojančios medžiagos pernešamos paviršiuje ir stebime netiesinius difuzijos ir konvekcijos transportavimo procesus. Jau vien šių efektų skaitinis modeliavimas yra rimtas skaičiavimo matematikos iššūkis.

Pranešime aptarsime dar vieną labai svarbią modelio savybę – atskirų sričių sandūroje formuluojamos nestandartinės jungtinumo sąlygos. Pirmoji iš jų aprašo masės tvermės reikalavimą ir ji išreiškiama klasikine pilnų srautų tolydumo sąlyga. Tačiau antroji sąlyga aprašo dalelių peršokimo iš vienos srities į kitą galimybę, gauname netiesinę nestandartinę jungtinumo sąlygą. Tokio uždavinio sprendiniai jau nėra tolydūs (prisiminkime skysčių tekėjimo poringose terpėse uždavinį).

Pagrindinis vienmatis matematinis modelis gali būti apibendrintas ir prie jo prijungiami dvimačiai paraboliniai uždaviniai, kurie aprašo funkcijas, ankstesniame modelyje užduotas apriori. Papildyto modelio sprendiniai yra daug "turtingesni".

Skaitinio modeliavimo algoritmai grindžiami baigtinių tūrių schemomis. Jų pagrindinių savybių analizė yra atlikta sprendžiant specialiai parinktus modelinius uždavinius. Pastarieji gali būti interpretuojami, kaip skaidymo metodu gautų pagalbinių uždavinių sprendimas. Beje, skaidymo metodas gali būti naudojamas ir kaip savarankiškas originalus skaitinis algoritmas. Tokius tyrimus šiuo metu ir atliekame.

Labai įdomūs yra gautieji skaičiavimo rezultatai, pavyko stebėti naujus efektus. Svarbu bus patikrinti tokių modeliavimo rezultatų atitikimą realiems fiziniams eksperimentams.

Kviečiame dalyvauti.

Seminaro sekretorius A. Bugajev