



VILNIAUS UNIVERSITETAS
MATEMATIKOS IR INFORMATIKOS FAKULTETAS
INFORMATIKOS INSTITUTAS
KOMPIUTERINIO IR DUOMENŲ MODELIAVIMO KATEDRA

Kompiuterinio modeliavimo pirmo kurso mokslo tiriamojo darbo projekto planas

Kietafazės YAG sintezės reakcijos parametrų nustatymas kompiuteriniais modeliais

Determination of reaction parameters for solid-phase YAG synthesis using computer models

Atliko:

Arnas Vaicekauskas

parašas

Vadovas:

asist. dr. Rokas Astrauskas

Vilnius

2026

Turinys

1. Įvadas	3
2. Tyrimo tikslas	3
2.1. Uždaviniai	3
3. Literatūros apžvalga ir matematinis modelis	4
4. Metodologija	5
4.1. Kompiuterinis modelis	5
4.2. Modelio parametų optimizavimas	5
4.3. Skaičiavimų lygiagretinimas	5
4.4. Naudojami įrankiai	5
5. Tyrimo duomenys	5
5.1. Terminas	5
5.2. Resursai	5
6. Projekto valdymas	6
7. Įsivertinimas ir tolimesni tyrimai	6
7.1. Sėkmės kriterijus	6
7.2. Tolimesni tyrimai	6
Literatūros šaltiniai	7

1. Įvadas

Itrio aliuminio granatas (YAG) yra sintetinis kristalas, kuris pasižymi pageidaujamomis optinėmis savybėmis. Ši medžiaga naudojama įvairiose srityse, pavyzdžiui, aukštos energijos šviesolaidžiuose [9] ir aukštos energijos lazeriuose [3]. Konkrečiai sričiai pritaikyti YAG kristalai būna legiruoti su retųjų žemių metalų jonais, kurie suteikia kristalui papildomų savybių. Minėtuose šviesolaidžiuose naudojamas YAG būna legiruotas su erbio arba iterbio jonais, o lazerių aktyviosioms terpėms gaminti dažniausiai naudojamas YAG kristalas legiruotas su neodimiu arba ceriu.

YAG kristalai turi daugybę taikymų, todėl šios medžiagos sintezės būdai yra plačiai tiriami. Keletas iš žinomų sintezės būdų yra nusodinimas (*angl. co-precipitation*) [12], beslėgis sukepinimas (*angl. pressureless sintering*) [4], zolio-gelio metodas (*angl. sol-gel*) [10], tačiau šiame tyrime bus nagrinėjama kietafazė (*angl. solid-state*) sintezės reakcija, kuri išsiskiria paprastu praktiniu įgyvendinimu – itrio ir aliuminio oksidų mišinys yra kaitinamas aukštoje temperatūroje, kurioje pradeda formotis YAG kristalai.

Atlikti šią reakciją laboratorijoje reikalauja daug laiko ir energijos, tačiau kompiuterinis šios reakcijos modelis gali padėti greitai ir pigiai nustatyti optimalų reakcijos vykdymo laiką, temperatūrą ir pamatyti mikroskopinius procesus, kurių tiesiogiai matyti negalime dėl fizinių sąlygų reikalingų reakcijai vykdyti.

Šios reakcijos modelį sudaro keletas fizikinių parametru, kuriuos būtina nustatyti norint, kad modelio rezultatai atitiktų fizinius rezultatus. Šiam tikslui pasiekti bus naudojami eksperimentiniu būdu gauti reakcijos duomenys, kuriuos paruoš Vilniaus Universiteto Chemijos fakulteto mokslininkai.

2. Tyrimo tikslas

Šio **darbo tikslas** – sudaryti kompiuterinį kietafazės YAG sintezės reakcijos modelį ir nustatyti jo fizinius parametrus naudojantis eksperimentiniais duomenimis bei įvertinti modelio tikslumą.

2.1. Uždaviniai

- Įgyvendinti kompiuterinį modelį pritaikytą MIF superkompiuteriui, kuris spęstų diferencialinių lygčių sistema aprašyta YAG sintezės reakcija.
- Patobulinti kompiuterinį modelį – modeliuoti sumažėjusią difuziją vietose, kuriose YAG koncentracija yra padidėjusi.
- Įgyvendinti programinį karkasą, kuris leistu atlikti parametru paiešką lygiagretinant skaičiavimus tarp daugelio superkompiuterio skaičiavimo mazgų.
- Naudojant kompiuterinį modelį surasti optimalius modelio parametrus

3. Literatūros apžvalga ir matematinis modelis

Kietafazės YAG sintezės modeliavimas nėra nauja sritis, šios reakcijos modeliai yra aktyviai tiriami [13]. Šis modelis yra pagrįstas F. Ivanausko et al. pasiūlytu reakcijos-difuzijos modeliu [6], kurio fiziniai parametrai buvo rasti susijusiuose tyrimuose [8, 5]. Šiame darbe modeliuojamas cheminis procesas atrodo štai taip: ruošiant eksperimentą yra sudaromas homogeniškas ir stoichiometrinis aliuminio (Al_2O_3) ir itrio (Y_2O_3) oksidų miltelių mišinys. Abiejų oksidų milteliai yra sutrinti taip, kad vidutinis dalelių tūris būtų $1 \mu\text{m}^3$. Mišinys yra kaitinamas krosnyje 1000°C , 1200°C , 1600°C temperatūrose kelias dešimtis valandų, per kurias susiformuoja YAG kristalai. Yra žinoma, kad mechaninis maišymas gali pagreitinti reakcijos trukmę, todėl naujesniuose tyrimuose šis procesas yra įtraukiamas į modelį [13]. Tyrimuose procesas yra modeliuojamas kaip trijų netiesinių diferencialinių lygčių sistema:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \nabla^2 c_i + \alpha_i k c_1 c_2, \quad \alpha = (-3, -5, 2), \quad i = 1, 2, 3$$

Čia $c_i = c_i(\mathbf{x}, t)$ yra medžiagų koncentracijos taške \mathbf{x} laiko momentu t . Medžiagos sunumeruotos taip: itrio oksidas ($i = 1$), aliuminio oksidas ($i = 2$) ir YAG ($i = 3$). D_i – medžiagų difuzijos konstantos, o k – reakcijos greičio konstanta.

Laikoma, kad metalų dalelės yra tolygiai pasiskirsčiusios po erdvę, todėl modeliuojama tik maža, vienos dalelės dydžio sritis.

Straipsnyje sistema sprendžiama standartiniu Oilerio metodu (*angl. Euler method*), tačiau dviejų dimensijų modeliams egzistuoja efektyvesni metodai, pavyzdžiui neišreikštinis kintamosios krypties metodas (*angl. alternating direction implicit, ADI*), kurį pritaikius kartu su laiko žingsnio didinimo strategija galima efektyviai modeliuoti eksponentiškai didesnes erdves su tokia pačia diskrečių taškų rezoliucija [11]. Tyrime YAG sintezę modeliuosime remdamiesi šiuo matematiniu modeliu.

Yra žinoma, kad šioje sintezės reakcijoje formuojasi tarpiniai junginiai – itrio aliuminio perovskitas (YAP) bei monoklininis itrio aluminatas (YAM) [7], tačiau šis modelis į tai neatsižvelgia. Jei krosnies temperatūra nėra pakankamai aukšta, šie dariniai reakcijos eigoje nedingsta, kas ženkliai sumažina kristalo kokybę. Šiame tyrime taip pat buvo iširta kaip nuo dalelių dydžio priklauso galutinio produkto išeiga – nustatyta, kad optimaliausi dalelių dydžiai yra 110nm itrio oksido dalelėms, o aliuminio oksido – 90nm, tokiu atveju vykdant reakciją prie 1450°C galima pasiekti 93% YAG turinio pagal tūrį.

4. Metodologija

4.1. Kompiuterinis modelis

Tyrime YAG sintezės reakcijai modeliuoti bus sukurtas kompiuterinis modelis pagrįstas egzistuojančiu matematiniu modeliu.

4.2. Modelio parametrų optimizavimas

Naudojant eksperimentinius duomenis, standartinių algoritmų pagalba bus nustatyti optimalūs modelio parametrai su kuriais modelio rezultatai tiksliausiai atitinka eksperimento duomenis.

4.3. Skaičiavimų lygiagretinimas

Dėl didelės duomenų ir skaičiavimų apimties, kompiuterinis modelis bus pritaikytas veikti lygiagrečiai and MIF superkompiuterio infrastruktūros.

4.4. Naudojami įrankiai

Kompiuterinis modelis apibūdinantis kietafazę YAG reakciją bus sudaromas specialiai šiam tyrimui pasitelkiant egzistuojančias technologijas leidžiančias išnaudoti MIF superkompiuterio resursus efektyviam skaičiavimui. Modelio programinis kodas bus rašomas kalba Julia, naudojant šios kalbos ekosistemoje egzistuojančius paketus įvairiems tikslams:

- LinearAlgebra.jl – efektyviam tiesinės algebros uždavinių sprendimui
- MPI.jl – žinučių perdavimo sąsaja, kuri apibrėžia standartą, kaip programa superkompiuteryje bendrauja tarpusavyje tarp skirtingų skaičiavimo vienetų
- CairoMakie.jl [2] – paketas leidžiantis sudaryti aukštos kokybės duomenų vizualizacijas
- ir daug kitų.

5. Tyrimo duomenys

Duomenys tyrimui bus gauti bendradarbiaujant su Vilniaus Universiteto Chemijos fakulteto mokslininkų pagalba. Laboratorijoje bus vykdoma YAG sintezės reakcija, kuriai analizuoti bus pasitelktas spektrografas, iš šio prietaiso duomenų galima nustatyti produkto ir reagentų santykį skirtingais laiko momentais. Eksperimentai taip pat bus vykdomi prie skirtingų temperatūrų.

5.1. Terminas

Duomenys bus paruošti per ateinantį mėnesį t. y. iki 2026-05-01.

5.2. Resursai

Kadangi cheminius eksperimentus atlieka VU CHF mokslininkai, resursų klausimo asmeniškai spręsti nereikia.

6. Projekto valdymas

Norint užtikrinti projekto sėkmę, tyrimas yra išskaidytas į tiksliai užduotis, kurios turi terminus (1 lentelė).

1 lentelė. Mokslo tiriamojo darbo projekto užduočių ir terminų sąrašas

Užduotis	Planuojama užbaigti
Kompiuterinis modelis paremtas egzistuojančiu matematiniu modeliu	2026-04-01
Kompiuterinis modelis paremtas nauju, sudėtingesniu matematiniu modeliu	2026-04-15
Papildomas karkasas parametrų paieškai	2026-05-01
Pagrindinių tyrimo rezultatų sudarymas – optimalių modelio parametrų paieška remiantis eksperimentinių rezultatų duomenimis	2026-05-15

7. Įsivertinimas ir tolimesni tyrimai

7.1. Sėkmės kriterijus

Pagrindinis šio tyrimo sėkmės vertinimo kriterijus yra kompiuterinio modelio rezultatų panašumas į eksperimentinius duomenis – jei vidutinė kvadratinė paklaida neviršija iš anksto nustatyto slenksčio, tai reiškia, kad tyrimo tikslas bus išpildytas.

7.2. Tolimesni tyrimai

Šiame tyrime naudojamas modelis nebūtinai yra iki galo tikslus, pavyzdžiui: yra žinoma, kad reakcijos metu, reaguojant itrio ir aliuminio oksidams produktas (YAG) susidaro ties šių dalelių sandūra, kur jis stabdo tolimesnę reagentų difuziją [1], todėl galima teigti, kad difuzijos konstantos priklauso nuo produkto koncentracijos erdvėje. Toks modelis būtų daug sudėtingesnis, tačiau tai galėtų lemti tikslesnius rezultatus ir todėl toks tyrimas būtų aktualus.

Literatūros šaltiniai

- [1] Jurgita Dabulytė-Bagdonavičienė, Anatolij Nečiporenko, Feliksas Ivanauskas, ir Aivaras Kareiva. Influence of different diffusion rates of reaction reagents on the synthesis of yttrium aluminium garnet (YAG). *Journal of Mathematical Chemistry*, 60(1):172–183, 2022.
- [2] Simon Danisch ir Julius Krumbiegel. Makie.jl: Flexible high-performance data visualization for Julia. *Journal of Open Source Software*, 6(65):3349, 2021.
- [3] Kana Fujioka, Kenta Yagasaki, Takuya Sawada, Hisashi Minemoto, Hiroshi Fuji, ir Kazuhisa Yamamoto. AlN–Ce-doped yttrium aluminum garnet composite ceramic phosphor for high-power laser lighting. *Optical Materials*, 121:111507, 2021.
- [4] A Ikesue ir YL Aung. Synthesis of transparent YIG ceramics by pressureless sintering. *Journal of the European Ceramic Society*, 42(14):6762–6765, 2022.
- [5] Feliksas Ivanauskas, Aivaras Kareiva, ir Bogdan Lapcun. Computational Modelling of the YAG Synthesis. *Journal of Mathematical Chemistry*, 46(2):427–442, 2009.
- [6] Feliksas Ivanauskas, Aivaras Kareiva, ir Bogdanas Lapcun. On the Modelling of Solid State Reactions.Synthesis of YAG. *Journal of Mathematical Chemistry*, 37(4):365–376, 2005.
- [7] Elizabeth R Kupp, Sujarinee Kochawattana, Sang-Ho Lee, Scott Mixture, ir Gary L Messing. Particle size effects on yttrium aluminum garnet (YAG) phase formation by solid-state reaction. *Journal of Materials Research*, 29(19):2303–2311, 2014.
- [8] Mažvydas Mackevičius, Feliksas Ivanauskas, Aivaras Kareiva, ir 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.
- [9] Yuli Pang, Xu Lu, Xin Zhang, Ziheng Miao, Min Sun, Guowu Tang, Jialong Li, Qilai Zhao, Changsheng Yang, Dongdan Chen, ir others. Recent advances in fabrication and applications of yttrium aluminum garnet-based optical fiber: a review. *Materials*, 17(14):3426, 2024.
- [10] Marc Singlard, Fabien Rémondière, Stéphane Oriol, Guiseppa Fiore, Bruno Vieille, Michel Vardelle, ir Sylvie Rossignol. Sol-gel synthesis of yttrium aluminum garnet (YAG): effects of the precursor nature and concentration on the crystallization. *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, 87(2):496–503, 2018.
- [11] Arnas Vaicekauskas. Maišymo proceso modeliavimas YAG reakcijose. Bakalauro darbas, Vilnius, 2025.
- [12] Hongzhi Wang, Lian Gao, ir Koichi Niihara. Synthesis of nanoscaled yttrium aluminum garnet powder by the co-precipitation method. *Materials Science and Engineering: A*, 288(1):1–4, 2000.
- [13] Vytenis Šumskas, Feliksas Ivanauskas, Aivaras Kareiva, Andrius Pakalniškis, ir Rokas Astrauskas. Yttrium aluminum garnet synthesis: Analysis of yield factors using modeling. *Chemical Engineering Research and Design*, 227:657–664, 2026.