



MMK seminaras

Penkerių metų laikotarpio matematika

Teresė Leonavičienė

2024-06-04

Veiklos kryptys

- Mokslinis darbas
- Mokomoji metodinė ir organizacinė veikla
- Kita veikla katedroje

Mokslinis darbas

Publikacijų sąrašas (paskelbtos)

- 1 Leonavičienė, T., Čiegis, R., Baltrėnaitė, E., Chemerys, V. Numerical analysis of liquid-solid adsorption model. *Mathematical Modelling and Analysis*, **24**(4):598-616, 2019. <https://doi.org/10.3846/mma.2019.036> (Q₂)
- 2 Leonavičienė, T., Pukalskas, S., Pumputis, V., Kulešienė, E., Žuraulis, V. Investigation of Factors That Have Affected the Outcomes of Road Traffic Accidents on Lithuanian Roads. *The Baltic Journal of Road and Bridge Engineering*, **15**(5): 1-20, 2020. <https://doi.org/10.7250/bjrbe.2020-15.504> (Q₃)

Mokslinis darbas

- 3 Baltrėnaitė-Gedienė, E., Leonavičienė, T., Baltrėnas, P. Comparison of CU(II), MN(II) and ZN(II) adsorption on biochar using diagnostic and simulation models. *Chemosphere*, **245**(2020): 125562,2020.
<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2019.125562> (Q_1)
- 4 Šarko, J., Leonavičienė, T., Mažeikienė, A. Research and Modelling the Ability of Waste from Water and Wastewater Treatment to Remove Phosphates from Water. *Processes* **10**(2):412, 2022. <https://doi.org/10.3390/pr10020412> (Q_2)
- 5 Baltrėnas, P., Crivellini, A., Leonavičienė, T., Chlebnikovas, A. Investigation on particulate matter and gas motion processes in the advanced multi-channel cyclone-separator with secondary gas inlets. *Environmental Engineering Research*, **27**(1):200550-0, 2022.
<https://doi.org/10.4491/eer.2020.550> (Q_1)

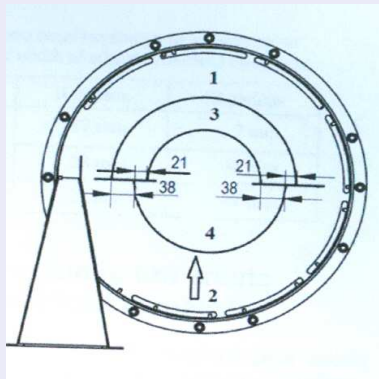
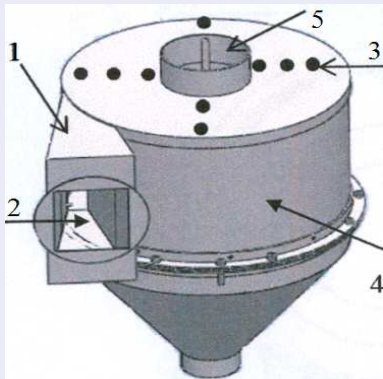
Daugiakanalis ciklonas

Bendradarbiavimas su *Aplinkos apsaugos institutu*

2013 – 2015 m. dalyvauta žmogiškųjų išteklių plėtros projekte *Naujos konstrukcijos daugiakanalis ciklonas. Akronimas DAKACIKAS*. Projekto vadovas – prof. P. Baltrėnas.

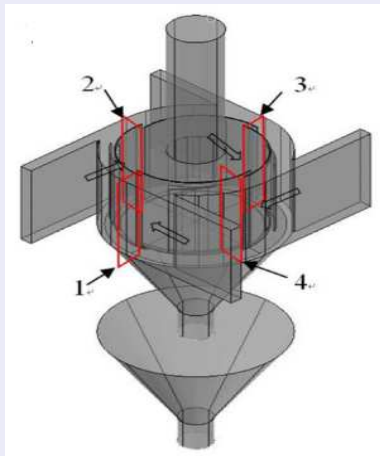
Daugiakanalis ciklonas

Keturkanalis ciklonas



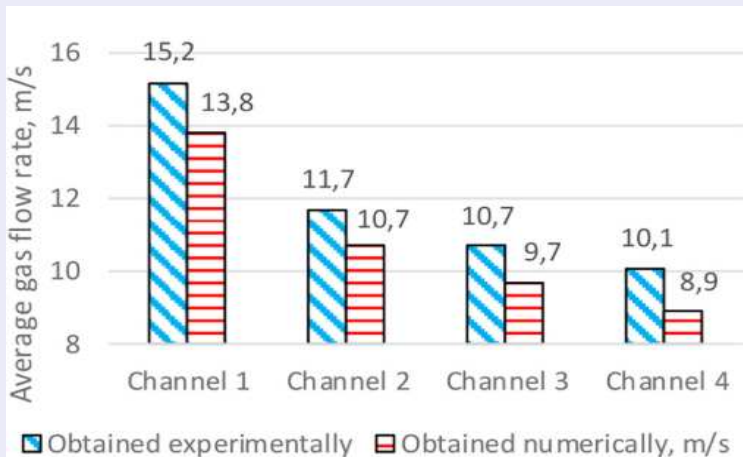
Daugiakanalisis ciklonas

Ciklono konstrukcija



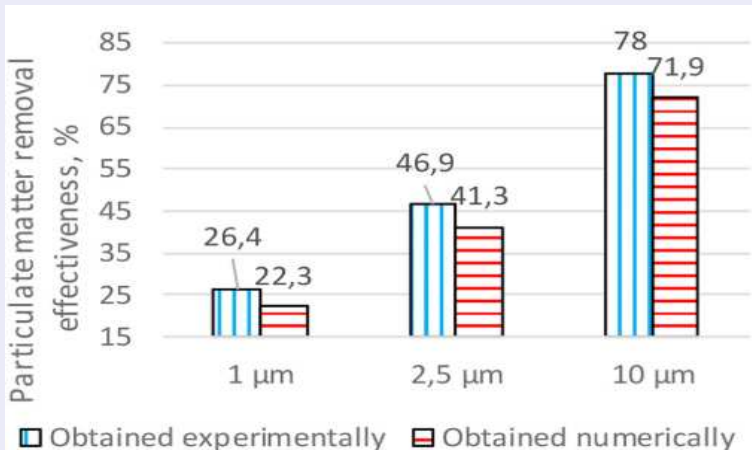
Daugiakanalis ciklonas

Gauti rezultatai: greitis



Daugiakanalis ciklonas

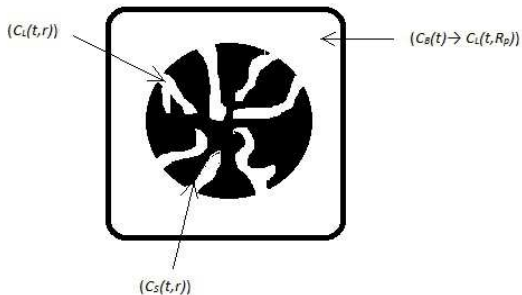
Gauti rezultatai: efektyvumas



Daugiakanalis ciklonas

Baltrėnas, P., Crivellini, A., Leonavičienė, T., Chlebnikovas, A. Investigation on particulate matter and gas motion processes in the advanced multi-channel cyclone-separator with secondary gas inlets. *Environmental Engineering Research*, **27**(1):200550-0, 2022. <https://doi.org/10.4491/eer.2020.550>.

Adsorbcijos procesas



Adsorbcijos procesą apibūdinančios lygtys

Tirpalo pernaša nuo paviršiaus į poros vidų

$$\frac{\partial C_B(t)}{\partial t} = -k_m A \left(C_B(t) - C_L(t, r_p) \Big|_{r_p=R_p} \right), \quad (1)$$

čia k_m – pernašos koeficientas, $A = \frac{mS}{V}$, m – adsorbento masė, S – adsorbento išorinio paviršiaus plotas, V – tirpalo tūris, R_p – dalelės spindulys.

¹V. Russo, R. Tesser, M. Trifuoggi, M. Giugni and M. Di Serio. A dynamic intraparticle model for fluid-solid adsorption kinetics. *Computers & Chemical Engineering*. **74**:66-74, 2015

Adsorbcijos procesą apibūdinančios lygtys

Masės balansas dalelės viduje

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{\partial C_L(t, r)}{\partial t} + (1 - \varepsilon) \frac{\partial C_S(t, r)}{\partial t} & \quad (2) \\ = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\varepsilon D_P r^2 \frac{\partial C_L(t, r)}{\partial r} + (1 - \varepsilon) D_S r^2 \frac{C_S(t, r)}{C_L(t, r)} \frac{\partial C_L(t, r)}{\partial r} \right), \end{aligned}$$

čia ε – dalelės poringumas, r – atstumas nuo dalelės centro, D_P , D_S – poros ir paviršiaus difuzijos koeficientai.

Adsorbcijos procesą apibūdinančios lygtys

Langmuir izoterma

$$C_S(t, r_p) = C_{S,*} b \frac{C_L(t, r_p)}{1 + b C_L(t, r_p)}, \quad (3)$$

čia b – Langmuir adsorbcijos konstanta $C_{S,*}$ prisisotinimo koncentracija poroje.

Adsorbcijos procesą apibūdinančios lygtys

Masės balansas skystyje ir kietojoje poros dalyse ((2) išraiška per skystosios fazės koncentraciją)

$$\begin{aligned} & \left(\varepsilon + (1 - \varepsilon) \frac{\partial C_S}{\partial C_L} \right) \frac{\partial C_L(t, r)}{\partial t} \\ & = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \left(\varepsilon D_P + (1 - \varepsilon) D_S \frac{C_{S,*} b}{1 + b C_L(t, r)} \right) \frac{\partial C_L(t, r)}{\partial r} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Adsorbcijos procesą apibūdinančios lygtys

Pradinės ir kraštinės sąlygos

$$C_B(0) = C_B^0, \quad C_L(0, r) = C_L^0, \quad 0 \leq r \leq R_p, \quad (5)$$

$$r^2 \frac{\partial C_L(t, r)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad r^2 \frac{\partial C_S(t, r)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} & \left(\varepsilon D_P + (1 - \varepsilon) D_S \frac{C_S(t, r)}{C_L(t, r)} \right) \frac{\partial C_L(t, r)}{\partial r} \Big|_{r=R_p} \\ & = k_m (C_B(t) - C_L(t, r)) \Big|_{r=R_p}. \end{aligned} \quad (7)$$

Adsorbcijos procesą apibūdinančios lygtys

Langmuir izotermos (3) atveju sąlyga ant paviršiaus užrašoma taip:

$$\begin{aligned} & \left(\varepsilon D_P + (1 - \varepsilon) D_S \frac{C_{S,*} b}{1 + b C_L(t, r)} \right) \frac{\partial C_L(t, r)}{\partial r} \Big|_{r=R_p} \\ & = k_m (C_B(t) - C_L(t, r_p) \Big|_{r=R_p}). \end{aligned} \quad (8)$$

Adsorbcijos proceso skaitinė analizė

- sudaryta korektiška adsorbcijos modelio aproksimacija,
- sudarytas modelio supaprastinimas (linearizuota ir normalizuota sistema),
- atlikti skaitiniai eksperimentai, kurių metu gauti rezultatai tiek taikant pilną modelį, tiek ir supaprastintą.

Adsorbcijos proceso skaitinė analizė

Leonavičienė, T., Čiegis, R., Baltrėnaitė, E., Chemerys, V.
Numerical analysis of liquid-solid adsorption model.
Mathematical Modelling and Analysis, **24**(4):598-616, 2019.
<https://doi.org/10.3846/mma.2019.036>

LMT finansuojamas projektas *Elementų singenetiškumo lignoceliuliozinėje žaliavoje įtaka adsorbcinėms bioanglies savybėms*. Dalyvauta: 2019 m. gegužė – 2019 m. rugsėjis.
Projekto vadovė – prof. E. Baltrėnaitė-Gedienė.

Skirtingų metalų adsorbcijos proceso modeliavimas

Harkins-Jura izoterma

$$\frac{1}{C_S^2} = \frac{B}{A} - \frac{1}{A} \ln C_L, \quad (9)$$

čia A , B - Harkins-Jura modelio konstantos.

Skirtingų metalų adsorbcijos proceso modeliavimas

Lagergren pirmosios eilės pseudomodelis

$$\frac{dq_t}{dt} = k_1(q_e - q_t), \quad (10)$$

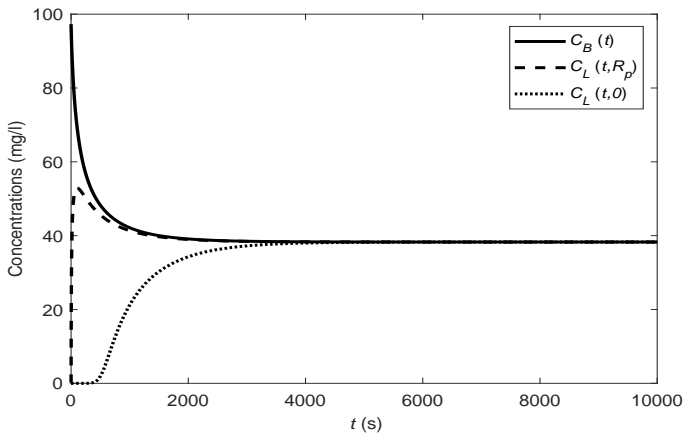
Ho and McKay antrosios eilės pseudomodelis

$$\frac{dq_t}{dt} = k_2(q_e - q_t)^2, \quad (11)$$

čia q_e – adsorbuota medžiaga nusistovėjus pusiausvyrai, q_t – laiko momentu t , k_1 , k_2 – modelių konstantos.

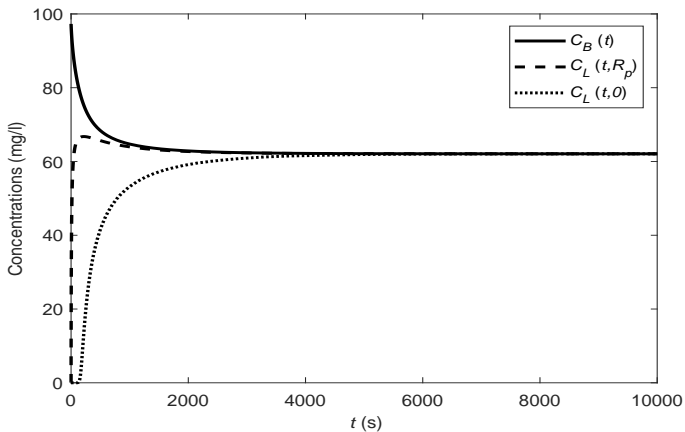
Metalų adsorbcija pasitelkiant bioadsorbentą

Cu(II)



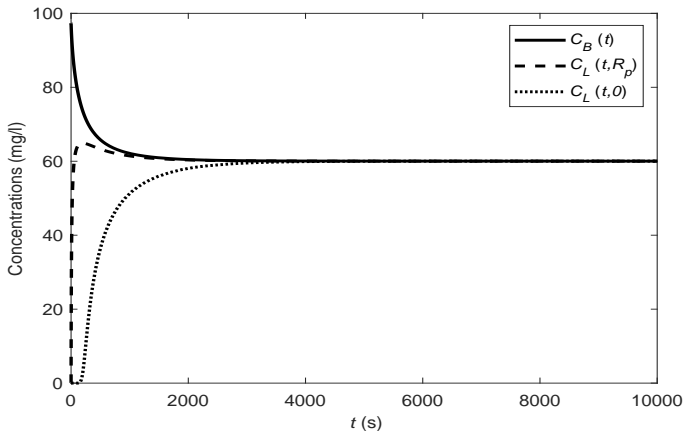
Metalų adsorbcija pasitelkiant bioadsorbentą

Mn(II)



Metalų adsorbcija pasitelkiant bioadsorbentą

Zn(II)



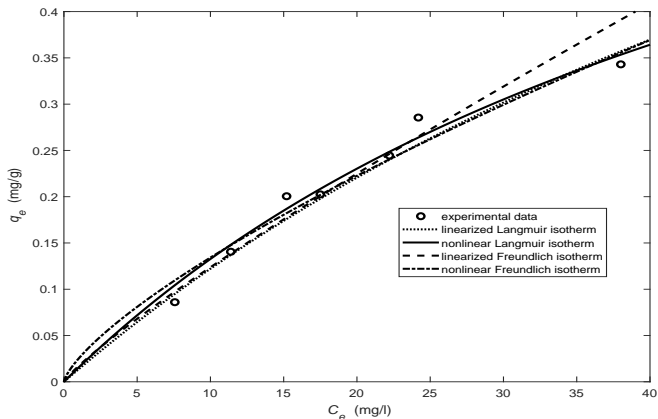
Skirtingų metalų adsorbcijos proceso modeliavimas

Baltrėnaitė-Gedienė, E., Leonavičienė, T., Baltrėnas, P.
Comparison of CU(II), MN(II) and ZN(II) adsorption on
biochar using diagnostic and simulation models. *Chemosphere*,
245(2020): 125562,2020.
<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2019.125562>.

Bendradarbiavimas su *Aplinkos apsaugos ir vandens inžinerijos katedra*

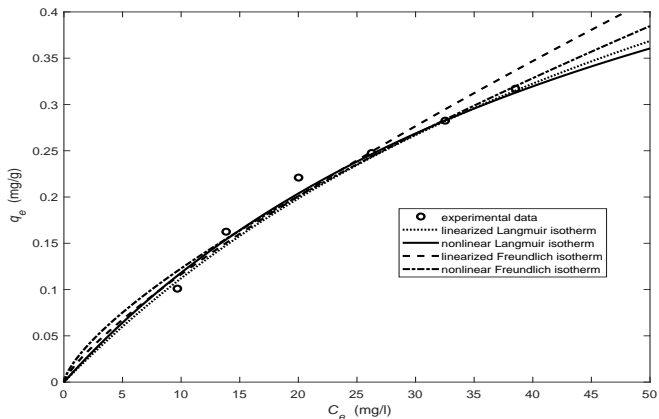
Fosfatų šalinimas iš vandens pasitelkiant kitų procesų metu susidaranti atliekas

Kvarcinis smėlis



Fosfatų šalinimas iš vandens pasitelkiant kitų procesų metu susidaranti atliekas

Degintas dumblas



Fosfatų šalinimas iš vandens

Šarko, J., Leonavičienė, T., Mažeikienė, A. Research and Modelling the Ability of Waste from Water and Wastewater Treatment to Remove Phosphates from Water. *Processes* **10**(2):412, 2022. <https://doi.org/10.3390/pr10020412>.

Tekstilės dažų šalinimas iš vandens

Liugė, M., Paliulis, D., Leonavičienė, T. Application of three-dimensional porous aerogel as adsorbent for removal of textile dyes from water. *Applied sciences*. **14**(10):4274, 1-22, 2024. <https://doi.org/10.3390/app14104274>.

Bendradarbiavimas su *Automobilių inžinerijos katedra*

Lietuvos keliuose įvykusių eismo įvykių analizė

Nagrinėti 2010 – 2015 m.m. Lietuvoje įvykę įskaitiniai eismo įvykiai, kuriuose nukentėjo ir/arba žuvo žmonės. Duomenų aibė sudaryta iš 30 853 įrašų apie eismo įvykių dalyvius. Tyrimui buvo naudoti 18 175 įrašai.

Daugialypės logistinės regresijos modelis

$$P(Y = 1|\vec{X}) = \frac{\exp(z(\vec{X}))}{1 + \exp(z(\vec{X}))},$$

$$z(\vec{X}) = a + b_1x_1 + \dots + b_kx_k,$$

čia \vec{X} – k nepriklausomų komponentų vektorius, o a, b_1, \dots, b_k – modelio konstantos.

Koeficientai b_1, \dots, b_k yra naudojami dichotominių kintamųjų galimybių santykiams (OR) skaičiuoti.

$$OR = \exp(b_i)$$

Lietuvos keliuose įvykusių eismo įvykių analizė

Tikimybę, kad eismo įvykis baigsis žūtimi didina:

- 1) didesnis eismo įvykyje dalyvaujančių transporto priemonių skaičius ($OR = 1.87$),
- 2) tamsus paros metas ($OR = 2.27$),
- 3) blogos oro sąlygos (rūkas, sniegas ir pan.) ($OR = 1.86$),
- 4) neužsegti arba transporto priemonėje neįrengti saugos diržai ($OR = 2.21$).

Lietuvos keliuose įvykusių eismo įvykių analizė

Leonavičienė, T., Pukalskas, S., Pumputis, V., Kulešienė, E., Žuraulis, V. Investigation of Factors That Have Affected the Outcomes of Road Traffic Accidents on Lithuanian Roads. *The Baltic Journal of Road and Bridge Engineering*, **15**(5): 1-20, 2020. <https://doi.org/10.7250/bjrbe.2020-15.504>.

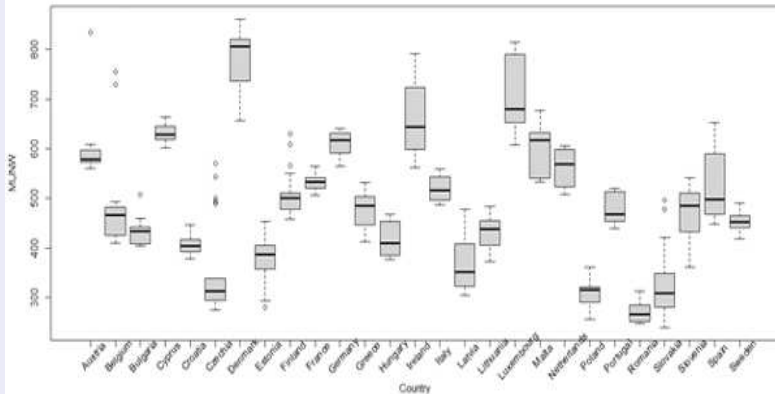
Bendradarbiavimas su *Verslo technologijų ir verslininkystės katedra*

2022 metais kartu rengėme paraišką LMT mokslininkų grupių projektams: *Žiedinės ekonomikos praktikos perdirbant atliekas ir mažinant medžiagų suvartojimą pasitelkiant išteklių našumą ir ateities scenarijų modeliavimas*

Aurelija Burinskienė, Teresė Leonavičienė ir Olga Lingaitienė.
Nagrinėjame komunalinių atliekų, perdirbamų komunalinių
atliekų ir perdirbamų biologinių atliekų kiekius ES šalyse
2000 m. – 2021 m.

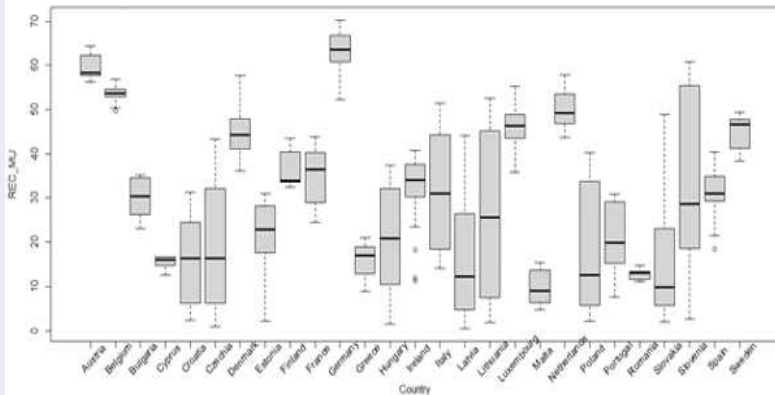
Atliekų tyrimas ES šalyse

Komunalinės atliekos



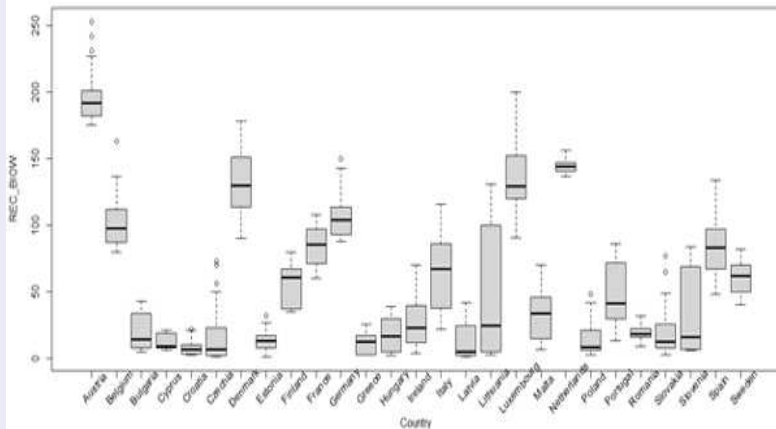
Atliekų tyrimas ES šalyse

Perdirbamos komunalinės atliekos



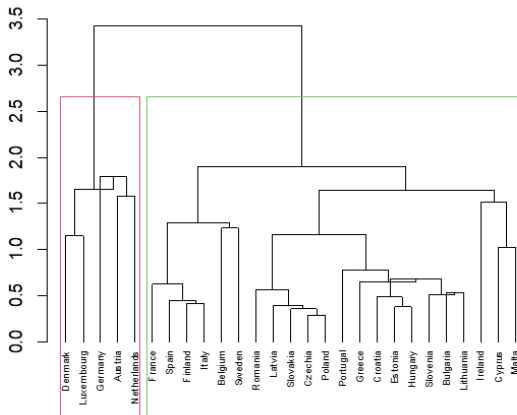
Atliekų tyrimas ES šalyse

Perdirbamos biologinės atliekos



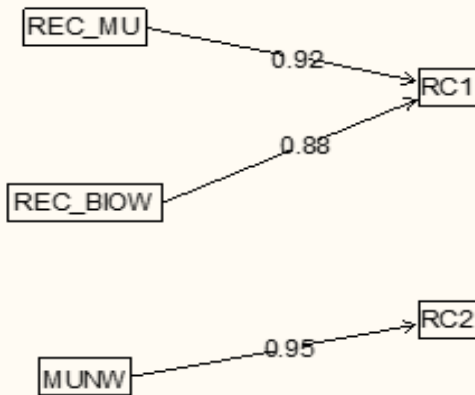
Atliekų tyrimas ES šalyse

Šalių klasteriai pagal tris atliekų rūšis



Atliekų tyrimas ES šalyse

Faktoriai



Dalyvavimas projektinėje veikloje

- LMT finansuojamas projektas *Elementų singenetiškumo lignoceliuliozinėje žaliavoje įtaka adsorbcinėms bioanglies savybėms*. Dalyvauta: 2019 m. gegužė – 2019 m. rugsėjis. Projekto vadovė – prof. E. Baltrėnaitė–Gedienė,
- ES ir Erasmus+ programos lėšomis finansuojamas tarptautinis projektas *Nauji geoerdvių inžinerijos kursai, skirti pakrančių ekosistemų prisitaikymui prie klimato kaitos/GEOCLIC*. Darbo projekte trukmė: 2021 – 2023 metai. Projekto vadovė – prof. E. Baltrėnaitė – Gedienė.

Dalyvavimo projekte rezultatas – mokomoji knyga:

Leonavičiene, T., Kirjackis, J., Baltrenaite-Gedienė, E.

Modelling of environmental processes and management: study book. Vilnius: Vilniaus Gedimino technikos universitetas, 2023. 203 p. <https://doi.org/10.20334/2023-055-S>

Mokomoji metodinė ir organizacinė veikla

Darbas su kitų fakultetų studentais

Moderniųjų technologijų matematikos studijų programos
priežiūra

Vadovavimas MTM studentų baigiamiesiems darbams (Ana, Digna, Matas)

Kita veikla

MMA2022 konferencija Druskininkuose (prisidėta rengiant ir skaitytas pranešimas),

LMD LXII konferencija Vilniuje 2021 m. (skaitytas pranešimas)

Dalyvauta rengiant dvi paraiškas LMT mokslininkų grupių projektams (kartu su Verslo vadybos fakulteto Verslo technologijų ir verslininkystės, Verslo vadybos katedrų kolegomis):

2022 m. – *Žiedinės ekonomikos praktikos perdirbant atliekas ir mažinant medžiagų suvartojimą pasitelkiant išteklių našumą ir ateities scenarijų modeliavimas*

2023 m. – *Paslaugų teikimo efektyvumo taikant moduliarizavimą didinimo sprendimai*

Kita veikla

Darbas leidžiant MMA žurnalą

Paskaitos moksleiviams, publikacijos pristatančios studijų programą, projektines veiklas.

