

Подставив  $n_{opt}$  в оценку (7), получим ее оптимальное значение

$$\|x - x_{n,\delta}\|_A^{opt} \leq \left(\frac{35}{27}\right)^{\frac{1}{4}} (2\delta\|x\|)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{4}}. \quad (9)$$

Из (9) вытекает, что оптимальная оценка погрешности не зависит от параметра  $\alpha$ , но от него зависит  $n_{opt}$ . Поэтому для уменьшения  $n_{opt}$  и, значит, объема вычислительной работы, следует брать  $\alpha$  по возможности большим, удовлетворяющим условию  $0 < \alpha \leq \frac{5}{4M}$  и так, чтобы  $n_{opt}$  было целым. Таким образом, доказана

**Теорема 3.** При условии  $0 < \alpha \leq \frac{5}{4M}$  оптимальная оценка погрешности для метода (3) имеет вид

$$\|x - x_{n,\delta}\|_A^{opt} \leq \left(\frac{35}{27}\right)^{\frac{1}{4}} (2\delta\|x\|)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{4}}$$

и получается при

$$n_{opt} = \left(\frac{35}{27}\right)^{\frac{1}{2}} (2\alpha\delta)^{-1} e^{-\frac{1}{2}} \|x\|.$$

Рассмотрим вопрос о том, когда из сходимости в энергетической норме следует сходимость в обычной норме гильбертова пространства  $H$ . Эти условия дает

**Теорема 4.** Если выполнены условия:

1)  $E_{\mathcal{E}}x_{n,\delta} = 0$ , 2)  $E_{\mathcal{E}}x = 0$ , где  $E_{\mathcal{E}} = \int_0^{\mathcal{E}} dE_{\lambda}$ ,  $\mathcal{E}$  - фиксированное положительное число ( $0 < \mathcal{E} < \|A\|$ ), то из сходимости  $x_{n,\delta}$  к  $x$  в энергетической норме следует сходимость в обычной норме гильбертова пространства.

**Замечание 1.** Так как  $x_{n,\delta} = A^{-1} [E - (E - \alpha A)^{2n}] y_{\delta}$ , то для того, чтобы  $x_{n,\delta}$  удовлетворяло условию  $E_{\mathcal{E}}x_{n,\delta} = 0$ , достаточно потребовать, чтобы  $E_{\mathcal{E}}y_{\delta} = 0$ . Т.о., если  $E_{\mathcal{E}}x = 0$  и  $E_{\mathcal{E}}y_{\delta} = 0$ , то из сходимости итераций в энергетической норме следует их сходимость в обычной норме пространства  $H$ .

**Замечание 2.** Использование энергетической нормы позволило нам получить оценки погрешности метода и априорный момент останова  $n_{opt}$  без требования знания искомого представления точного решения, что делает метод (3) эффективным и тогда, когда нет сведений об истокообразной представимости точного решения.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОКИНЕТИЧЕСКОГО ПЕРЕНОСА В НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ НА ОСНОВЕ LBE-АЛГОРИТМОВ

**Ивашкевич Е.В.**

*Белорусский государственный университет, г. Минск*

В последние 5 лет наблюдается значительный рост интереса к изучению явления электрокинетического переноса вещества, энергии и электрических зарядов. Это объясняется важностью электрокинетического массо- и теплопереноса в практических областях, связанных с разработкой и производством электромеханических систем на микро- и наномасштабах, а также топливных элементов.

Целью данной работы является разработка численной модели электрокинетического переноса в неоднородных системах на основе решёточных методов.

С термодинамической точки зрения, массоперенос в жидкости под действием внешнего приложенного электрического поля описывается системой дифференциальных уравнений в частных производных [1]: Навье-Стокса (гидродинамика), Пуассона (электростатика) и Нернста-Планка (конвекция и диффузия электрически нейтральных и заряженных частиц).

Теоретические основы электрокинетических явлений, заложенные в разработанную модель, имеют следующие приближения: система является изотермической, система находится в стационарном состоянии, вязкость в системе постоянна, диэлектрические константы не зависят от напряженности электрического поля, диэлектрические константы не зависят от плотности жидкости.

В основу построенной модели были положены разработанные в течение последних 10 лет альтернативные классическим конечно-разностным приближениям методы, основанные на решеточной схеме для каждого из уравнений: LPM (Lattice Poisson method) [2] для уравнения Пуассона, LCDM (Lattice Convection-Diffusion Method) [3] для стационарного уравнения Нернста-Планка и LBM (Lattice Boltzmann Method) [1] для уравнений Навье-Стокса.

Исторически первым был разработан метод решёточного уравнения Больцмана. Изначально он был получен на основе теории клеточных газовых автоматов, однако может рассматриваться как особого вида конечно-разностная схема для кинетического уравнения Больцмана [1]. Предполагается, что частицы существуют в дискретном фазовом пространстве и взаимодействуют синхронно. Это позволяет максимально эффективно адаптировать динамику их движения и взаимодействия для параллельных вычислений. Второй причиной, объясняющей постоянно возрастающую популярность данного метода моделирования, является то, что он обладает всеми преимуществами, свойственными кинетическим методам – в частности, чрезвычайно простой реализацией любых граничных условий, независимо от их геометрической или физической природы. Наконец, кинетическая природа метода решёточного уравнения Больцмана позволяет легко интегрировать его с решёточными моделями других физических и химических процессов.

Развитие метода решеточного уравнения Больцмана и тот факт, что поведение системы на макроскопическом уровне не чувствительно к тому, как система описывается на микроуровне, дало начало к разработке схожих методов решения уравнений, относящихся к тому же классу, что и уравнение Навье-Стокса – классу уравнений эллиптического типа в частных производных. К нему же относятся уравнения Нернста-Планка и уравнение Пуассона.

Решеточные уравнения, заложенные в основу методов LBM, LCDM и LPM, для решения поставленной задачи выглядят следующим образом [1, 2, 3]:

$$f_{\alpha}(\vec{r} + \vec{e}_{\alpha}, t+1) - f_{\alpha}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\tau} (f_{\alpha}(\vec{r}, t) - f_{\alpha}^{eq}(\vec{r}, t)) + \frac{\rho_e \vec{E}(\vec{e}_{\alpha} - \vec{v})}{\rho TR} f_{\alpha}^{eq}(\vec{r}, t) \quad (1)$$

$$g_{\alpha}^i(\vec{r} + \vec{e}_{\alpha}, t+1) - g_{\alpha}^i(\vec{r}, t) = \frac{1}{\tau} (g_{\alpha}^i(\vec{r}, t) - g_{\alpha}^{i,eq}(\vec{r}, t)) + \frac{Z_i F (\vec{e}_{\alpha} - \vec{v}) \cdot \nabla \Phi}{RT} g_{\alpha}^{i,eq}(\vec{r}, t) \quad (2)$$

$$h_{\alpha}(\vec{r} + \vec{e}_{\alpha}, t+1) - h_{\alpha}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\tau^g} (h_{\alpha}(\vec{r}, t) - h_{\alpha}^{eq}(\vec{r}, t)) + \left(1 + \frac{0.5}{\tau^g}\right) \delta_{i,g} w_{\alpha} h_{\alpha}^{eq}(\vec{r}, t) \quad (3)$$

$f_{\alpha}$ ,  $g_{\alpha}^i$ ,  $h_{\alpha}$  - одночастичные функции распределения для плотности жидкости, концентрации ионов  $\alpha$ -ого типа и потенциала (в последнем случае физического смысла не имеет),

$\vec{v}$  - скорость потока,  $\rho_e$  - суммарная плотность ионов,  $\rho$  - плотность жидкости,  $\vec{E}$  - напряженность электрического поля,  $T$  - температура,  $\Phi$  - потенциал,  $\bar{e}_\alpha$ ,  $\tau$ ,  $\tau^g$ ,  $\delta_{i,g}$  - параметры модели.

Переход от непрерывного к дискретному фазовому пространству позволил заменить ресурсоемкие операции интегрирования при нахождении макроскопических характеристик алгебраическим суммированием:

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, t) &= \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\vec{r}, t); & \vec{v}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\rho(\vec{r}, t)} \sum_{\alpha} \bar{e}_{\alpha} f_{\alpha}(\vec{r}, t); \\ c_i(\vec{r}, t) &= \sum_{\alpha} g_{\alpha}^i(\vec{r}, t); & \Phi(\vec{r}, t) &= \sum_{\alpha} h_{\alpha}(\vec{r}, t); \end{aligned} \quad (4)$$

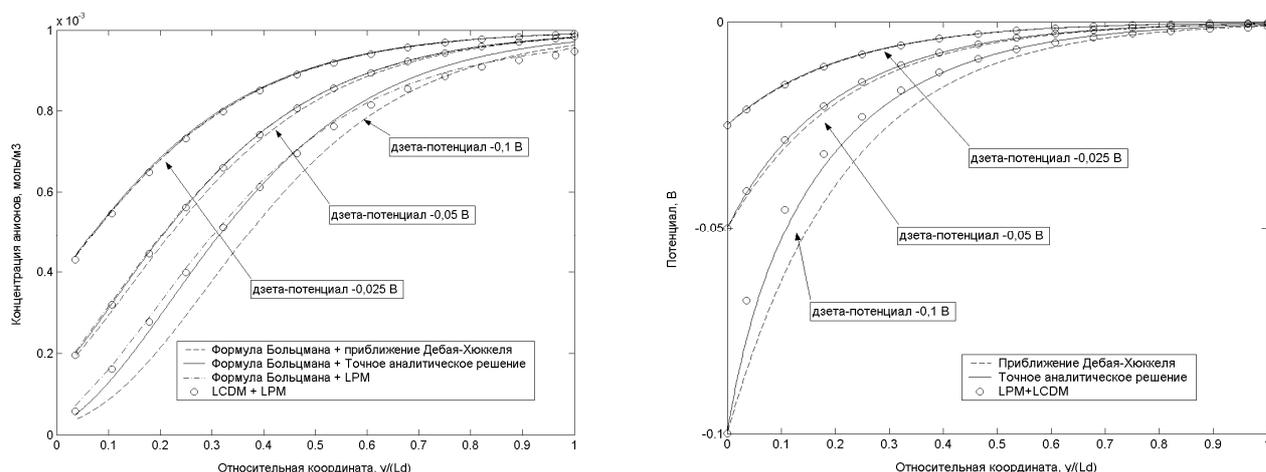
$c_i$  - концентрация  $i$ -ого типа ионов электролита.

Используя метод разложения в ряд Чепмена-Энскога [1], можно доказать, что система, описываемая уравнениями (1) - (3) на микроуровне, подчиняется макроскопическим уравнениям Навье-Стокса, Нернста-Планка и Пуассона, соответственно.

Моделируемая система представляет собой две параллельные, бесконечные по ширине пластины, с потенциалом  $\Phi_1$  и  $\Phi_2$ . Расстояние между пластинами  $H$ . Длина моделируемой системы  $L$ . Внешнее электрическое поле с напряженностью  $\vec{E}$ , вызывающее электроосмотический поток, считаем приложенным вдоль оси  $X$ . Пространство между пластинами заполнено электролитом.

В данной работе была реализована решеточная модель D2Q9. Положение решетки было выбрано таким образом, что граница раздела фаз проходит между узлами.

Проверка адекватности построенной модели проводилась путем последовательного усложнения моделируемой системы.



**Рисунок 1. Распределение концентрации ионов и потенциала, полученные путем моделирования посредством LPM и LCDM ( $\vec{E} = 0$ ) и с использованием распределения Больцмана для различных значений  $\phi_2$ . Расстояние между пластинами  $H = 7.9\mu\text{м}$ ,  $\lambda_D = 0.3\mu\text{м}$ ,  $T = 298.15\text{K}$ , равновесная концентрация ионов  $n_{\infty} = 0.001\text{моль/л}$ , потенциал верхней пластины  $\phi_2 = 0$ .**

Как видно из полученных результатов (Рисунок 1, Рисунок 2), решеточные методы дают результаты, близкие к аналитическим решениям, полученным для простейших моделей массопереноса. Однако для сложных неоднородных систем, которые применяются на практике, решения в аналитическом виде не существует. В таких случаях моделирование с

использованием численных методов является единственным возможным способом получения характеристик системы без проведения реального эксперимента (Рисунок 3).

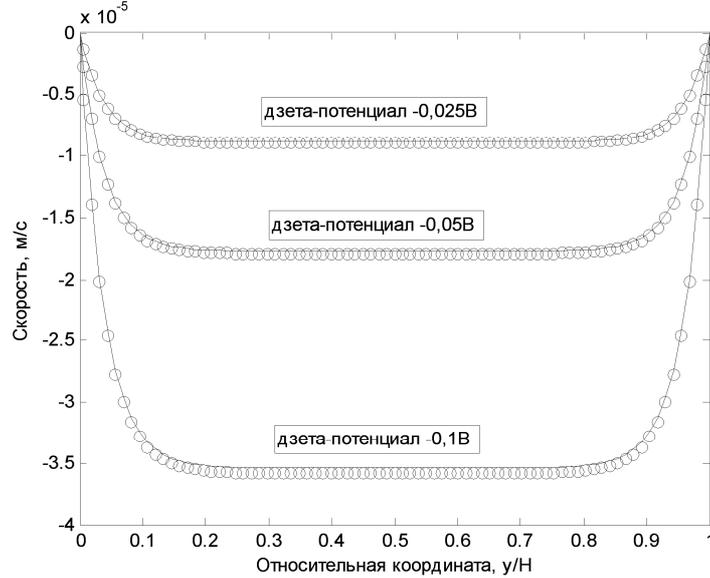


Рисунок 2. Профиль скорости при различных значениях дзета-потенциала (потенциала пластин).  $H = 8\mu\text{ì}$ ,  $\lambda_D = 0.3\mu\text{ì}$ ,  $T = 298.15\text{K}$ ,  $n_\infty = 0.001\text{ì} \hat{\text{e}}\ddot{\text{u}}/\text{ì}^3$ .

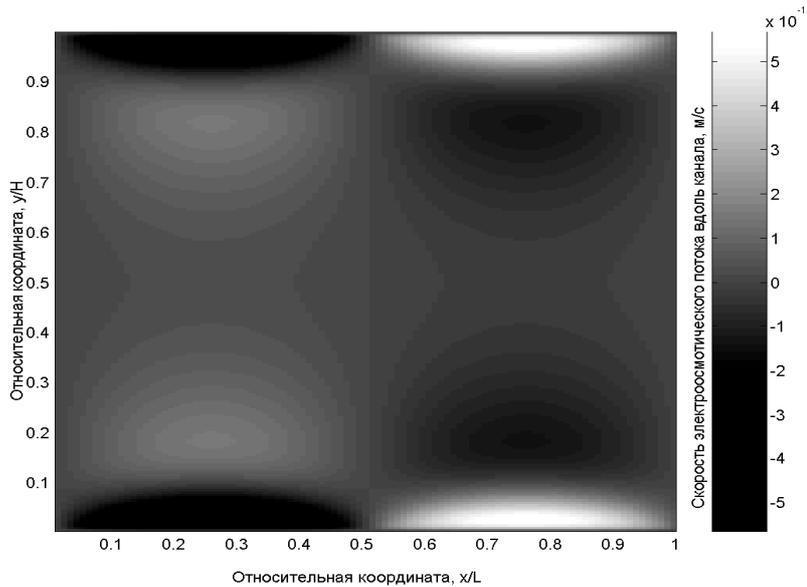


Рисунок 3. Профиль скорости электроосмотического потока в случае неравномерного распределения потенциала на пластинах  $\phi_1 = \phi_2 = 5\text{ì} \hat{\text{A}}$ ,  $x < 0.5L$  и

$\phi_1 = \phi_2 = -5\text{ì} \hat{\text{A}}$ ,  $x > 0.5L$ .  $L = 20\mu\text{ì}$ ,  $H = 20\mu\text{ì}$ ,  $\lambda_D = 0.3\mu\text{ì}$ ,  $T = 298.15\text{K}$ ,  $n_\infty = 0.001\text{ì} \hat{\text{e}}\ddot{\text{u}}/\text{ì}^3$ .

### Литература

1. Hlushkou, D. (2004) "Numerische Simulation von Stromung und Massentransport in (elektro-) chromatographischen Systemen"; Ph.D. Thesis, Otto-von-Guericke-Universitat, Magdeburg, Germany. (<http://diglib/uni-magdeburg.de/Dissertationen/2004/dzmlhushkou.htm>)
2. Jinku Wang, M. W., Zhixin Li (2006). "Lattice Poisson-Boltzmann simulations of electroosmotic flows in microchannels." J. Colloid Interface Sci. 296: 729-736.
3. Xiaoyi He, Ning Li (2000). "Lattice Boltzmann simulation of electrochemical systems." Commun. Comput. Phys. 129: 158-166.