

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

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

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

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

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

и получается при

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

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_{onm} без требования знания истокорпредставимости точного решения, что делает метод (3) эффективным и тогда, когда нет сведений об истокоробразной 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_{α} , g_{α}^i , h_{α} - одночастичные функции распределения для плотности жидкости, концентрации ионов α -ого типа и потенциала (в последнем случае физического смысла не имеет),

\vec{v} - скорость потока, ρ_e - суммарная плотность ионов, ρ - плотность жидкости, \vec{E} - напряженность электрического поля, T - температура, Φ - потенциал, \bar{e}_α , τ , τ^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 Φ_1 и Φ_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.

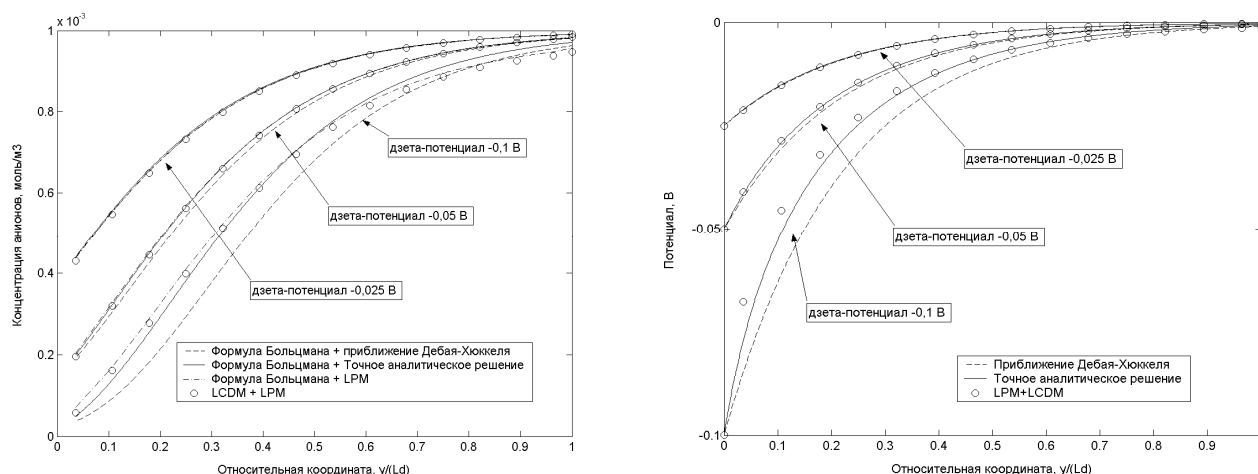


Рисунок 1. Распределение концентрации ионов и потенциала, полученные путем моделирования посредством LPM и LCDM ($\vec{E} = 0$) и с использованием распределения Больцмана для различных значений ϕ_2 . Расстояние между пластинами $H = 7.9\mu\text{м}$, $\lambda_D = 0.3\mu\text{м}$, $T = 298.15\text{K}$, 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).

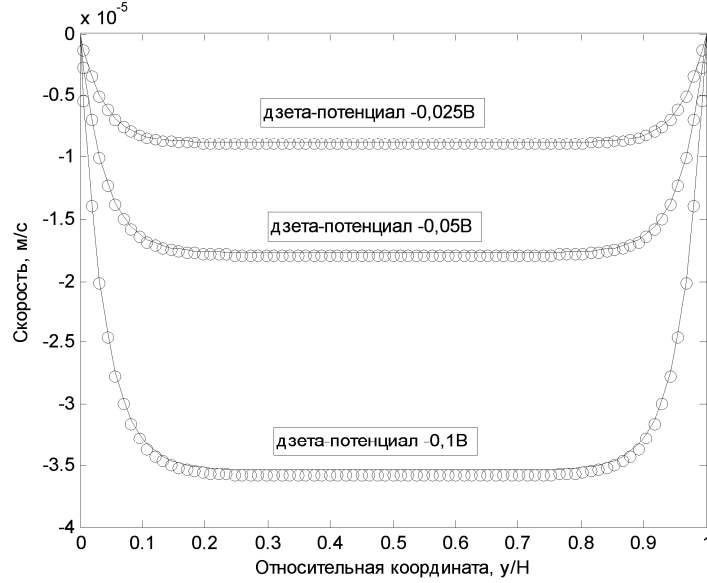


Рисунок 2. Профиль скорости при различных значениях дзета-потенциала (потенциала пластин). $H = 8\mu\text{ì}$, $\lambda_D = 0.3\mu\text{ì}$, $T = 298.15\text{K}$, $n_\infty = 0.001\text{ì} \hat{\text{e}}\ddot{\text{u}}/\text{ì}^3$.

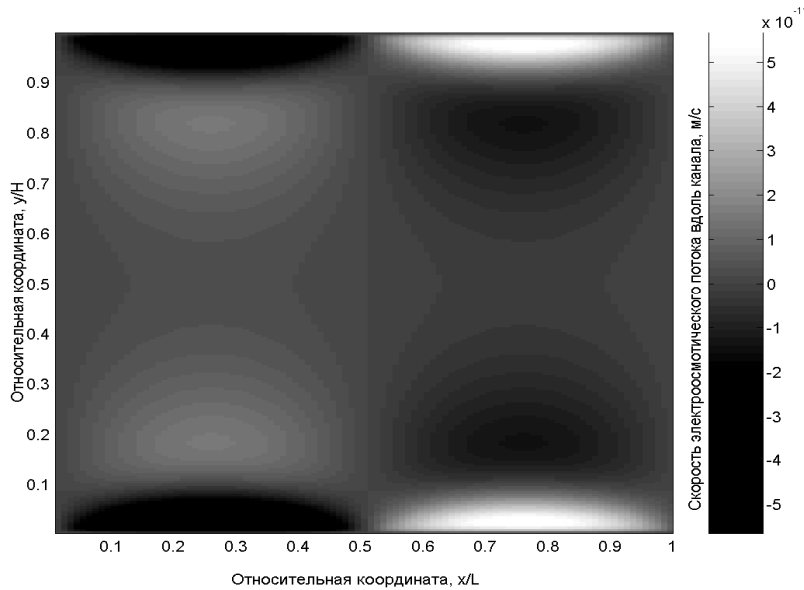


Рисунок 3. Профиль скорости электроосмотического потока в случае неравномерного распределения потенциала на пластинах $\phi_1 = \phi_2 = 5\text{ì} \hat{\text{A}}$, $x < 0.5L$ и

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

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.