

Математическое моделирование электрофореза в случае сильного электрического поля.

КУЦЕПАЛОВ АЛЕКСАНДР СЕРГЕЕВИЧ

Кубанский государственный университет (Краснодар), Россия

ФРАНЦ ЕЛИЗАВЕТА

Кубанский государственный университет (Краснодар), Россия

e-mail: gandizel@mail.ru

Постановка задачи. В данной работе исследуется движение проводящей сферической частицы радиуса r в растворе бинарного электролита под действием внешнего электрического поля напряженности E_∞ . Задача описывается системой Нернста-Планка-Пуассона-Стокса. Краевые условия задаются на поверхности частицы и в бесконечно удаленной области. Предполагается, что напряженность поля E_∞ достаточно велика для протекания электрофореза 2-го рода, который не поддается описанию с помощью классической теории электрокинетических явлений.

Изначальная система приводится к безразмерному виду. Безразмерные параметры: напряженность внешнего поля E_∞ , коэффициент сцепления κ между гидродинамикой и электростатикой и число Дебая ν . Система приводится к удобному для решения виду, делаются замены $\eta = \cos\theta$, $\rho = c^+ - c^-$ и $K = c^+ + c^-$, где c^+ и c^- – концентрации катионов и анионов, θ – зенитный угол.

Численный метод. Существуют трудности, осложняющих решение: нелинейная система в частных производных сильно сцеплена; имеется малый параметр ν при старшей производной. Кроме того, на полюсах частицы решение системы имеет особенности. На этапе моделирования был создан алгоритм решения задачи в полной постановке. Были использованы следующие методы:

- по переменной η применялся метод Галеркина; в качестве базисных функций использовались полиномы Лежандра;
- по r использовалась центральная разностная схема второго порядка точности; сетка выбирается либо равномерная, либо сгущающаяся вблизи частицы;
- по времени t использовался полунявный метод Рунге-Кутты 3-го порядка точности, в котором часть уравнения, содержащая неустойчивость вычисляется неявно, а остальная часть – явно.

Выполнение нелинейных операций производилось квазиспектральным методом. Для этого было разработано преобразование Фурье по указанным полиномам.

Результаты. Анализ расчётов выявил следующие особенности системы:

- чрезвычайно большой градиент концентрации одного сорта ионов (не проходящих через поверхность частицы) в малой окрестности частицы;
- слабое изменение полей концентраций ионов на расстоянии порядка 4-5 радиусов частицы;
- формирование вихрей за частицей, которые возникают из-за неоднородности распределения скоростей скольжения.

Результаты расчетов показали хорошее сходство с теоретическими результатами. В настоящей работе впервые выявлен переход от регулярного течения к хаотическому при достаточно высоких напряженностях внешнего поля.