



# Моделирование электрокинетического переноса в неоднородных системах на основе ЛВЕ-алгоритмов

Выполнил

*Магистрант кафедры системного анализа  
Ивашкевич Евгений Валерьевич*

Руководитель

*старший преподаватель кафедры системного анализа  
Скакун Виктор Васильевич*

Консультант

*Dr. Dzmitry Hlushkou, Max Planck Institute for Dynamics  
of Complex Technical Systems*

# Цели и задачи.

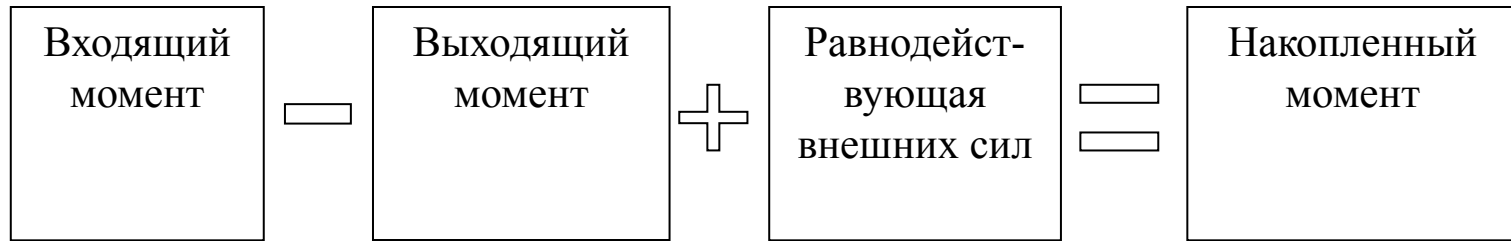
- Разработка численной модели электрокинетического переноса в неоднородных системах на основе решёточных методов.

# Актуальность задачи. Применение электрокинетических эффектов

- Создание электромеханических систем на микро- и наномасштабах.
  - «чипы-лаборатории»
  - электроосмотические насосы
  - электроосмотические микшеры
  - ...
- Биохимический анализ сложных смесей.
- Создание топливных элементов.
- ...

# Физические основы электрокинетических явлений.

*Гидродинамика. Уравнение движения.*



Уравнение Навье-Стокса:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_f \mathbf{v}) = - \left[ \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{v}) \mathbf{v} \right] - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \nabla p + \rho_f \mathbf{g} + \frac{\mathbf{F}}{\Delta x \Delta y \Delta z} \quad (1)$$

Уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{v}) = 0 \quad (2)$$

# Физические основы электрокинетических явлений.

## *Массоперенос.*

- *Диффузия*
- *Конвекция*
- *Миграция ионов в электрическом поле*

Уравнение Нернста-Планка:

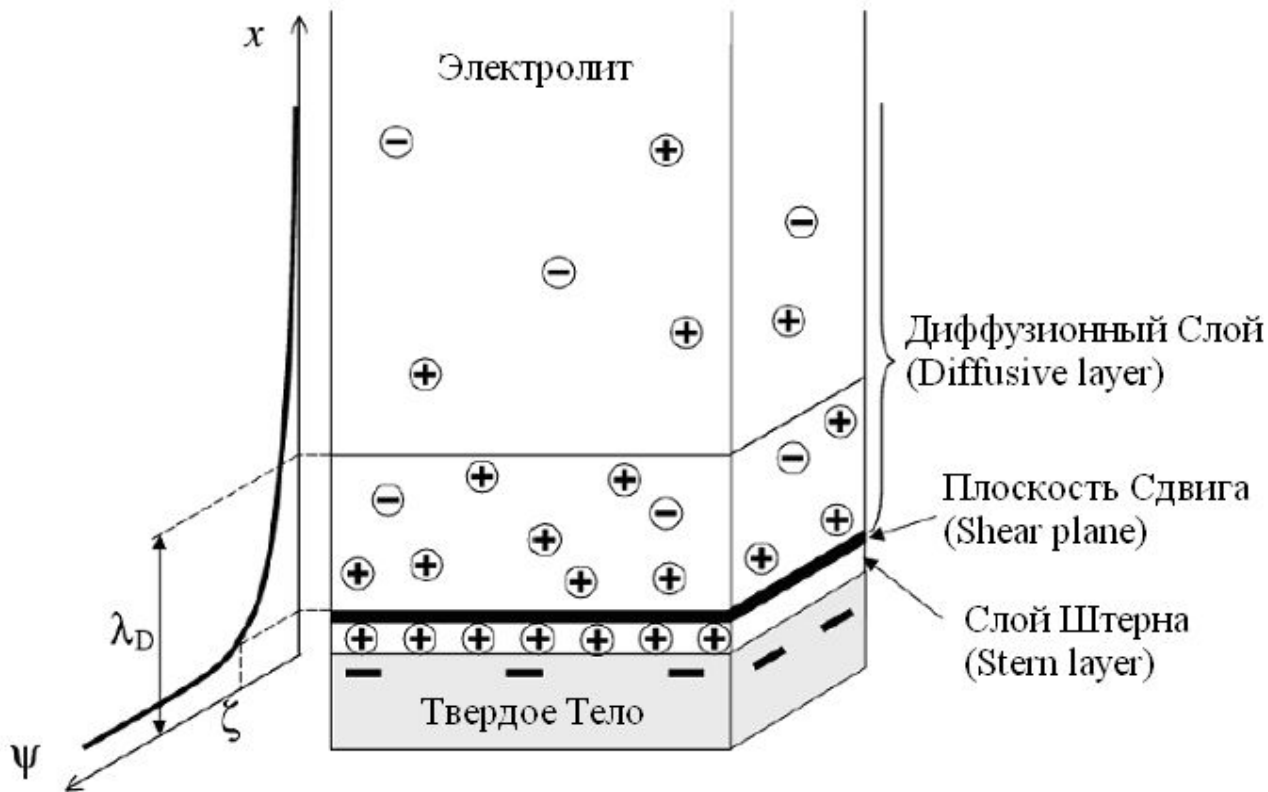
$$\nabla^2 n - \nabla \left( \frac{n}{D} \mathbf{v} \right) + \nabla \left( \frac{Z q_e n}{k_B T} \nabla \Phi \right) = 0 \quad (3)$$

Уравнение Пуассона:

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{\rho_q}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad \rho_q = \sum_{i=1}^N Z_i q_e n_i \quad (4)$$

# Физические основы электрокинетических явлений.

## *Электрический двойной слой.*



Уравнение Пуассона-Больцмана:

$$\nabla^2 \psi = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \sum_{i=1}^N q_e Z_i n_i^0 \exp\left(-\frac{Z_i q_e \psi}{k_B T}\right) \quad (5)$$

## Физические основы электрокинетических явлений.

### *Электроосмос и массопередача*

- *Электромиграция* – процесс перемещение отдельных ионов, вызванное прикладываемым электрическим полем.
- *Электроосмос* – явление возникновения потока в жидкости, вызванный электромиграцией во внешнем электрическом поле.

**Численные методы.** Уравнение Навье-Стокса. Кинетическое уравнение Больцмана. Кинетическое ВГК уравнение Больцмана. Решеточное уравнение Больцмана. Решеточное уравнение Больцмана в силовом поле.

Кинетическое уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \left( \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \right) f + \left( \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{u}} \right) f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_c \quad (6)$$

Решеточное уравнение Больцмана в силовом поле:

$$f_{\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\alpha}, t + 1) - f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau} \left( f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}^{eq}(\mathbf{r}, t) \right) + \frac{(\rho_e E - \nabla P) \cdot (\mathbf{e}_{\alpha} - \mathbf{v})}{\rho RT} f_{\alpha}^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (7)$$



**Численные методы.** Уравнение Навье-Стокса. Решеточное уравнение Больцмана. Определение макроскопических характеристик.

$$\rho(r, t) = \int m f(r, u, t) du$$

$$v(r, t) = \frac{1}{\rho(r, t)} \int m u f(r, u, t) du$$

$$T(r, t) = \frac{m^2}{Dk_B \rho(r, t)} \int (u - v)^2 f(r, u, t) du$$

$$\rho(r, t) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}(r, t)$$

$$v(r, t) = \frac{1}{\rho(r, t)} \sum_{\alpha} u_{\alpha} f_{\alpha}(r, t)$$

$$T(r, t) = \frac{m^2}{3k_B \rho(r, t)} \sum_{\alpha} (u_{\alpha} - v)^2 f_{\alpha}(r, t)$$

## Численные методы. Уравнение Нернста-Планка. LCDM

Уравнение Нернста-Планка:

$$\nabla^2 n - \nabla \left( \frac{n}{D} \mathbf{v} \right) + \nabla \left( \frac{Z q_e n}{k_B T} \nabla \Phi \right) = 0 \quad (8)$$

Решеточное уравнение Нернста-Планка:

$$g_\alpha^i(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\alpha, t + 1) - g_\alpha^i(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau^i} \left( g_\alpha^i(\mathbf{r}, t) - g_\alpha^{i,eq}(\mathbf{r}, t) \right) - \frac{Z_i F (\mathbf{e}_\alpha - \mathbf{v}) \cdot \nabla \Phi}{RT} g_\alpha^{i,eq}(\mathbf{r}, t) \quad (9)$$

Значение концентрации в узле решетки:

$$c_i = \sum_{\alpha} g_\alpha^i \quad (10)$$

## Численные методы. Уравнение Пуассона. LPM

Уравнение Пуассона:

$$\nabla^2 \psi = h_{rhs}(\mathbb{r}, t);$$

$$h_{rhs}(\mathbb{r}, t) = -\frac{\rho_q}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \quad (11)$$

$$\rho_q = q_e \sum_i Z_i n_i$$

Решеточное уравнение Пуассона:

$$h_\alpha(\mathbb{r} + \mathbf{e}_\alpha, t+1) - h_\alpha(\mathbb{r}, t) = -\frac{1}{\tau^g} \left( h_\alpha(\mathbb{r}, t) - h_\alpha^{eq}(\mathbb{r}, t) \right) + \left( 1 + \frac{0.5}{\tau^g} \right) \delta_{t,g} w_\alpha h_{rhs} \quad (12)$$

Значение потенциала в узле решетки:

$$\psi = \sum_\alpha g_\alpha \quad (13)$$

# Моделирование электрокинетических явлений. Общий подход.



## Моделирование электрокинетических явлений. *Приближения.*

- Система является изотермической (в частности, энергия не выделяется в виде тепла);
- Система находится в стационарном состоянии (переходные процессы отсутствуют);
- Вязкость в системе постоянна;
- Диэлектрические константы не зависят от напряженности электрического поля (отсутствует поляризация);
- Диэлектрические константы не зависят от плотности жидкости (отсутствуют эффекты электрострикции);

**Моделирование электрокинетических явлений.** Численная реализация  
решеточных алгоритмов.

**Фаза распространения**

Распространение функции распределения в  
соседние ячейки →

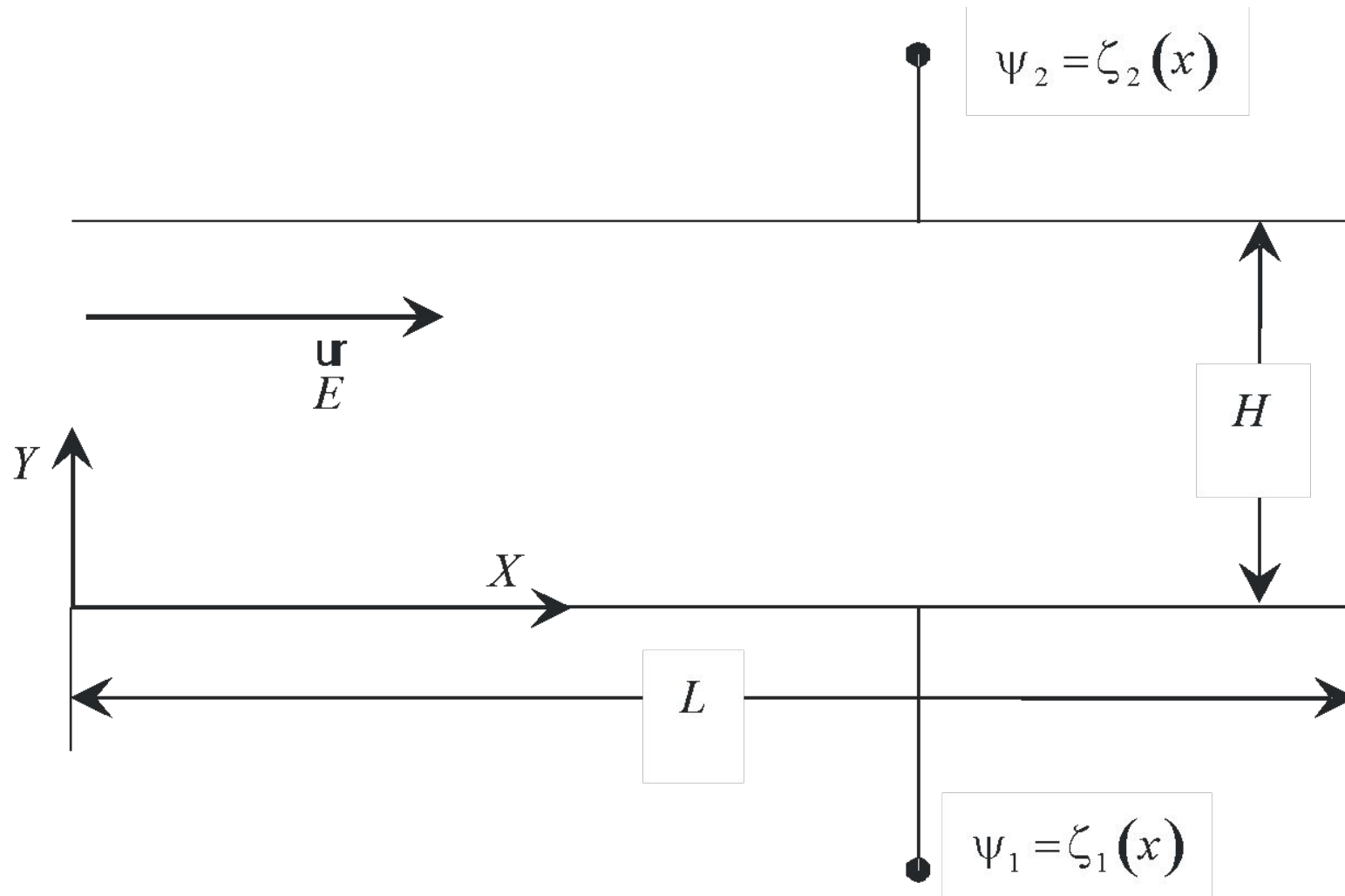
**Фаза столкновений**

↓  
Расчет макроскопических характеристик.

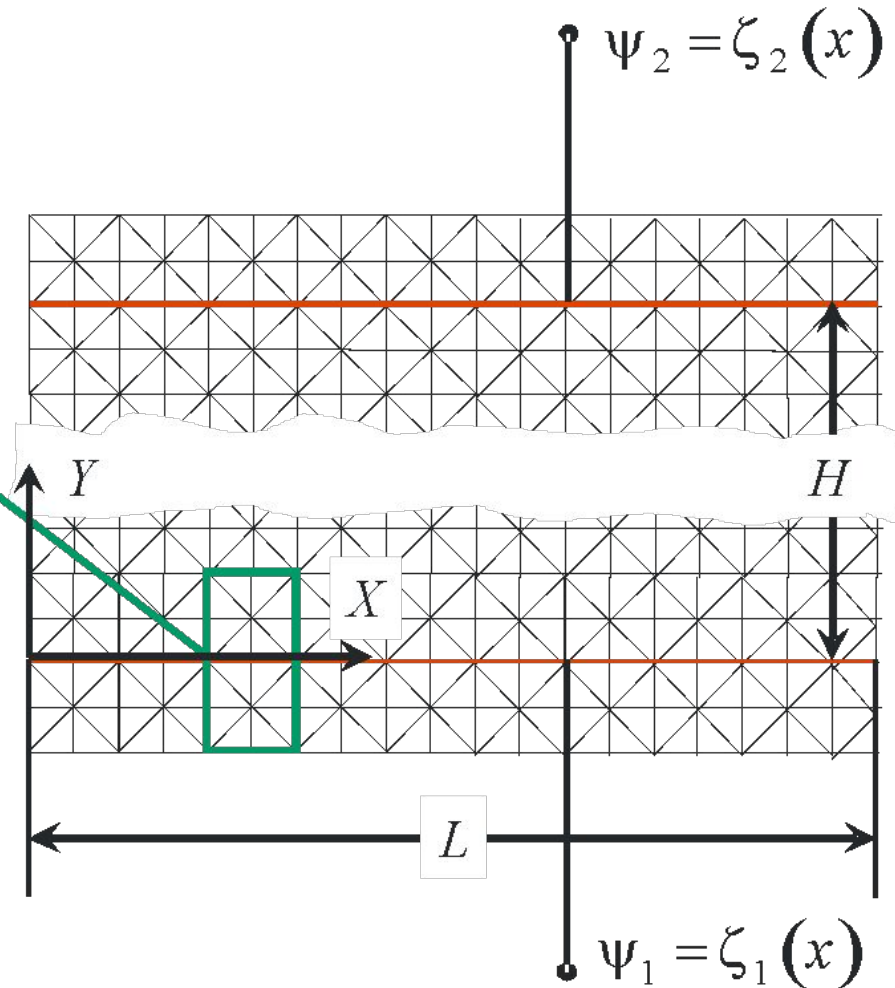
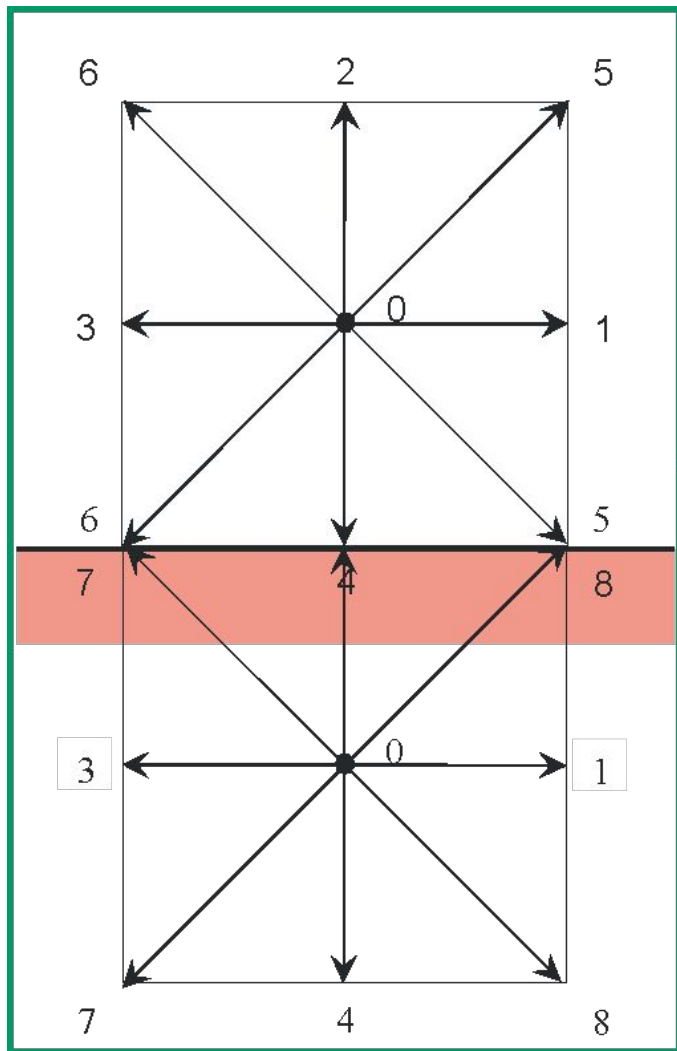
↓  
Расчет равновесной функции  
распределения.

↓  
Расчет функций распределения.

**Моделирование электрокинетических явлений.** *Моделируемая система. Физическое представление.*

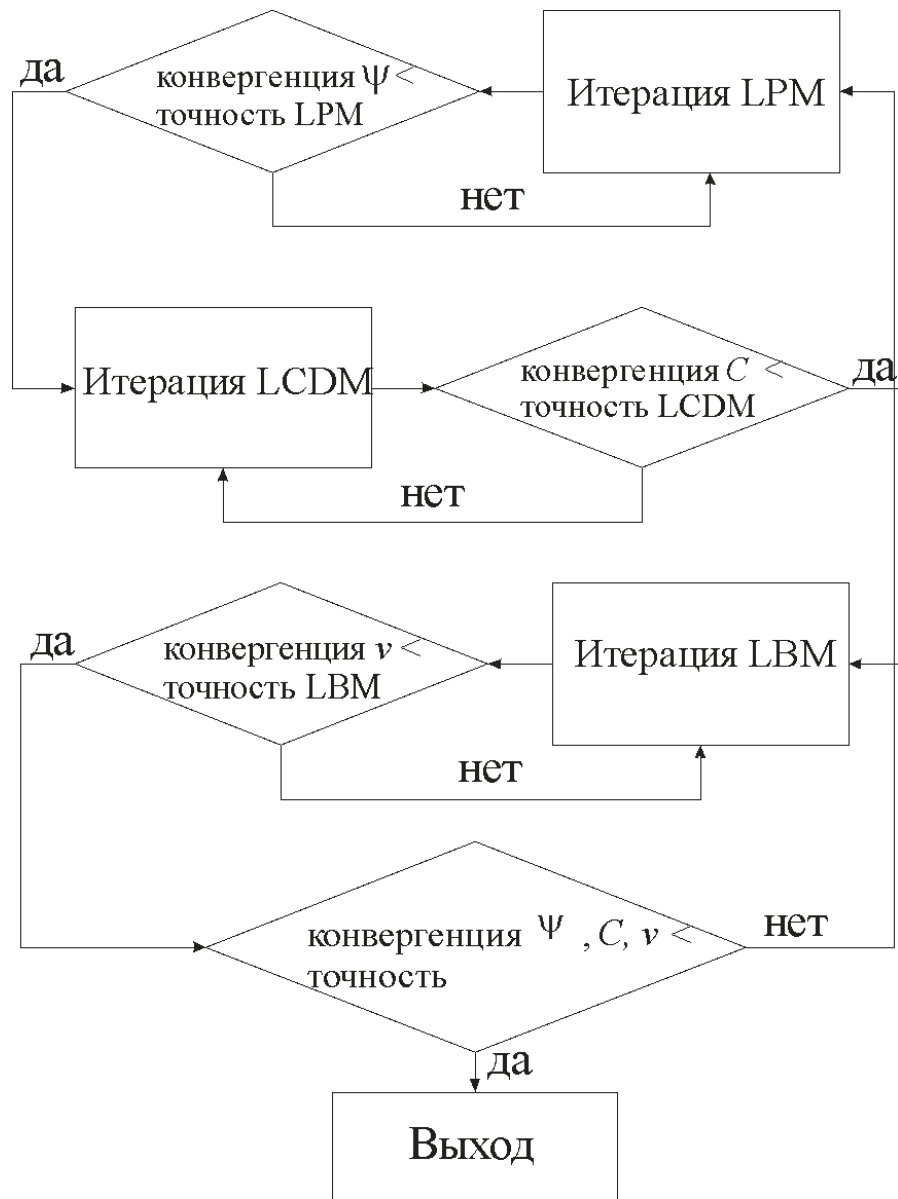


**Моделирование электрокинетических явлений.** *Моделируемая система. Физическое представление. Решеточная модель D2Q9.*



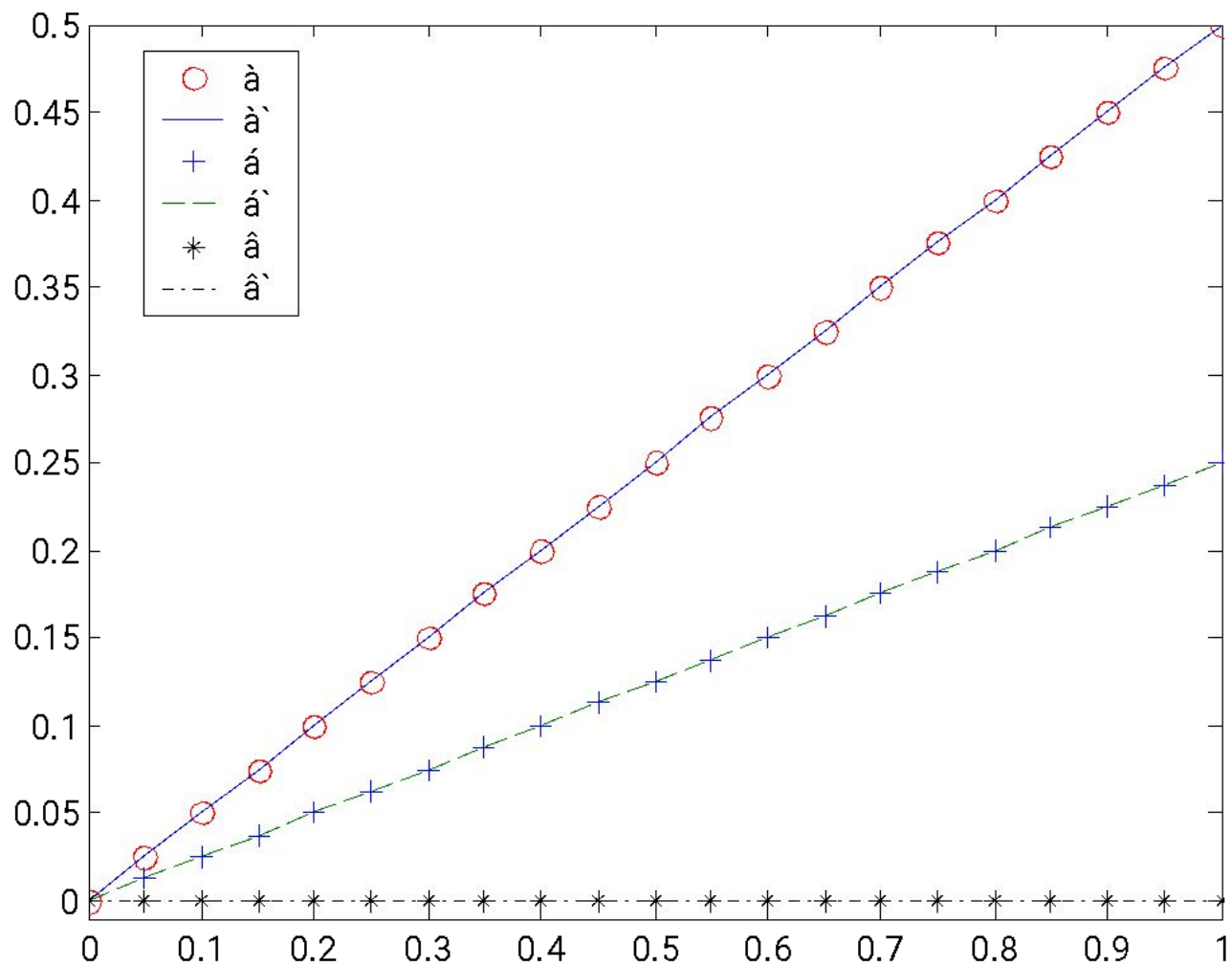


# Моделирование электрокинетических явлений. Алгоритм моделирования.

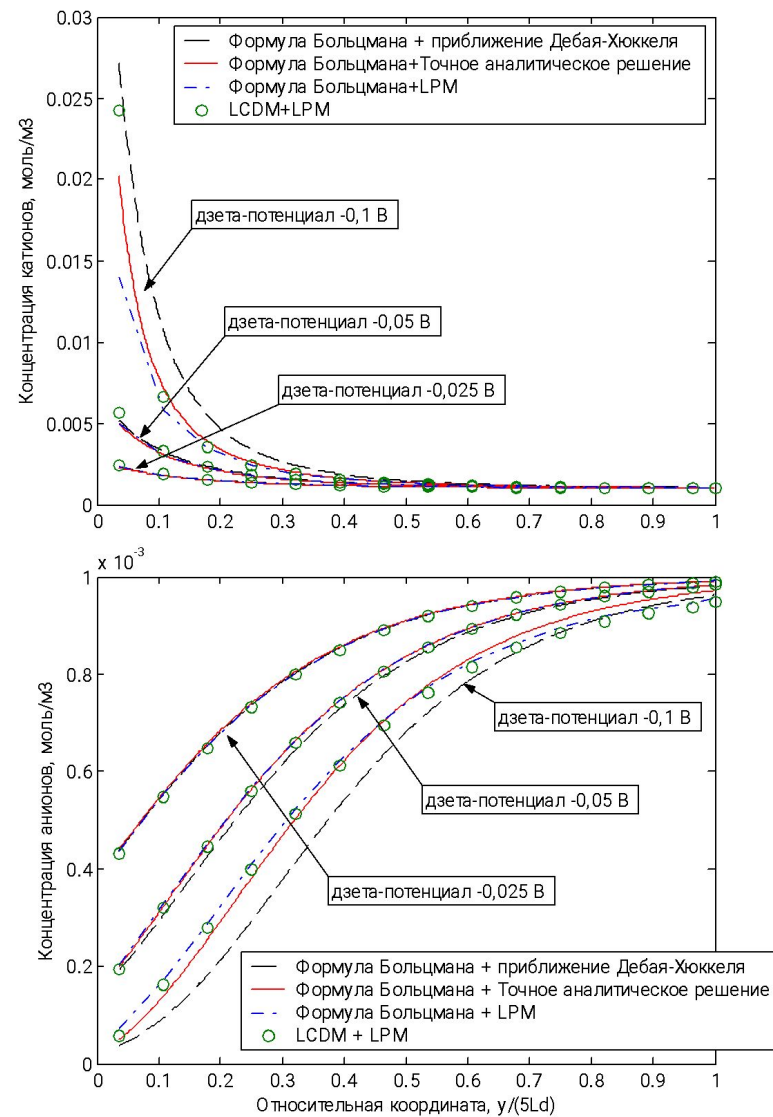
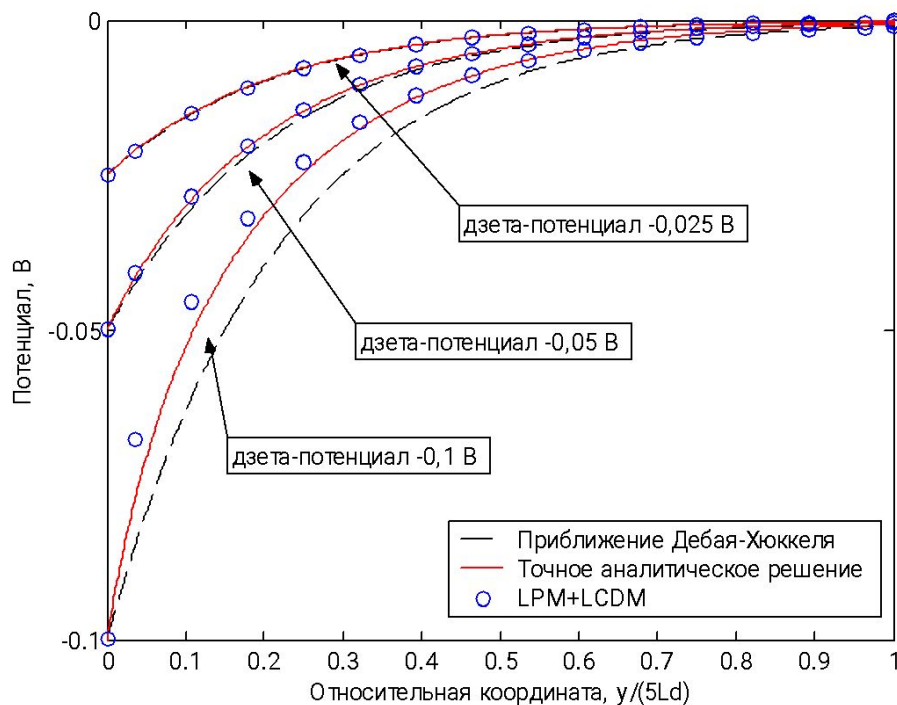


## Результаты моделирования электрокинетических явлений.

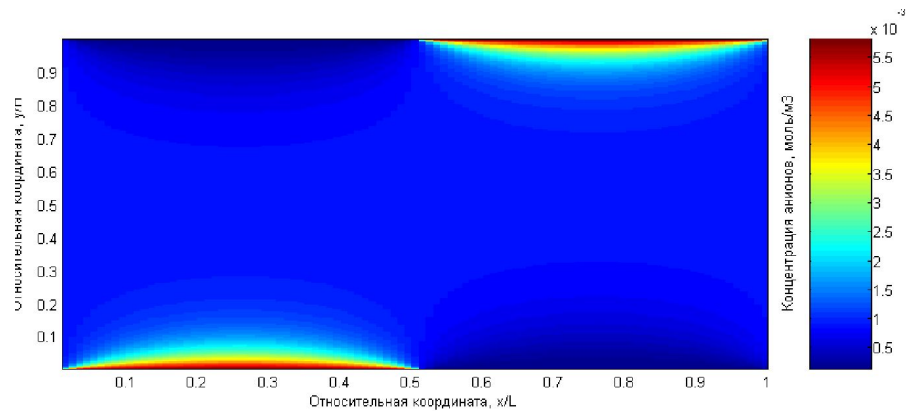
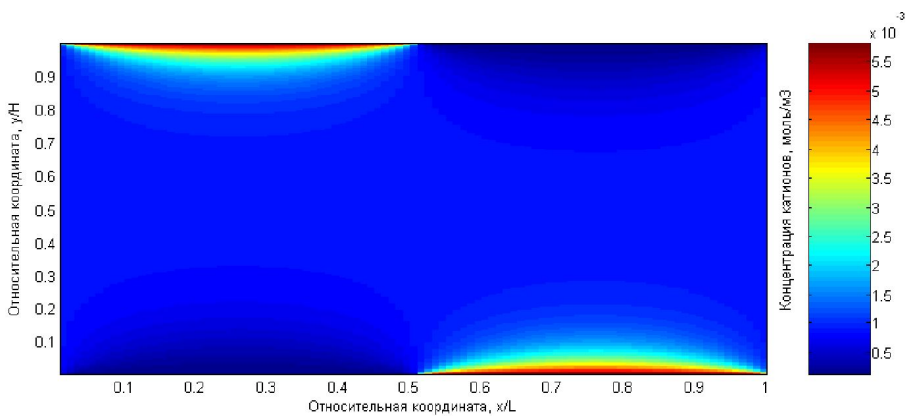
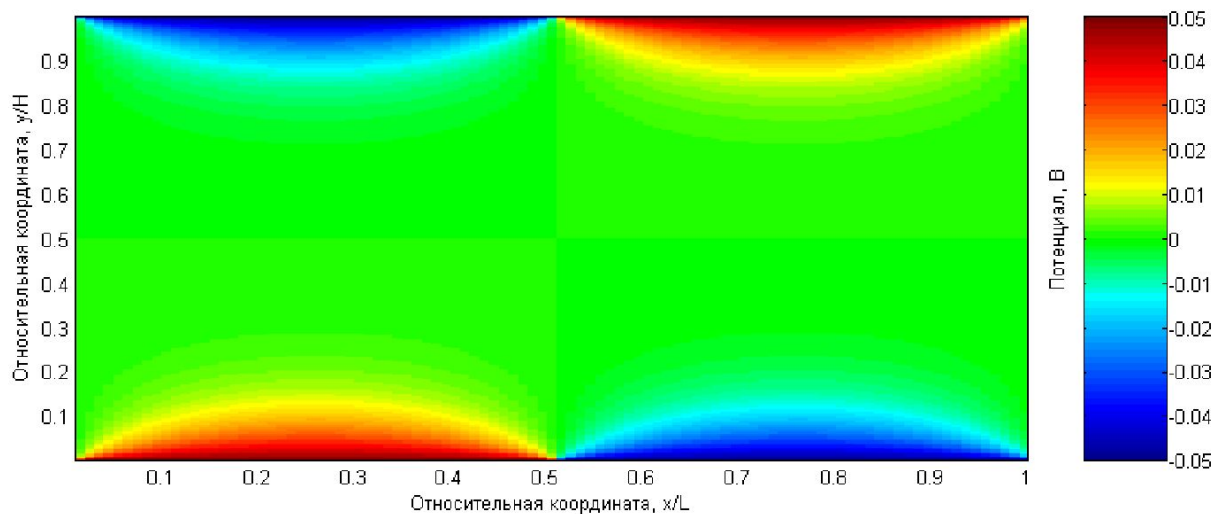
*Отсутствие ионов в жидкости.*



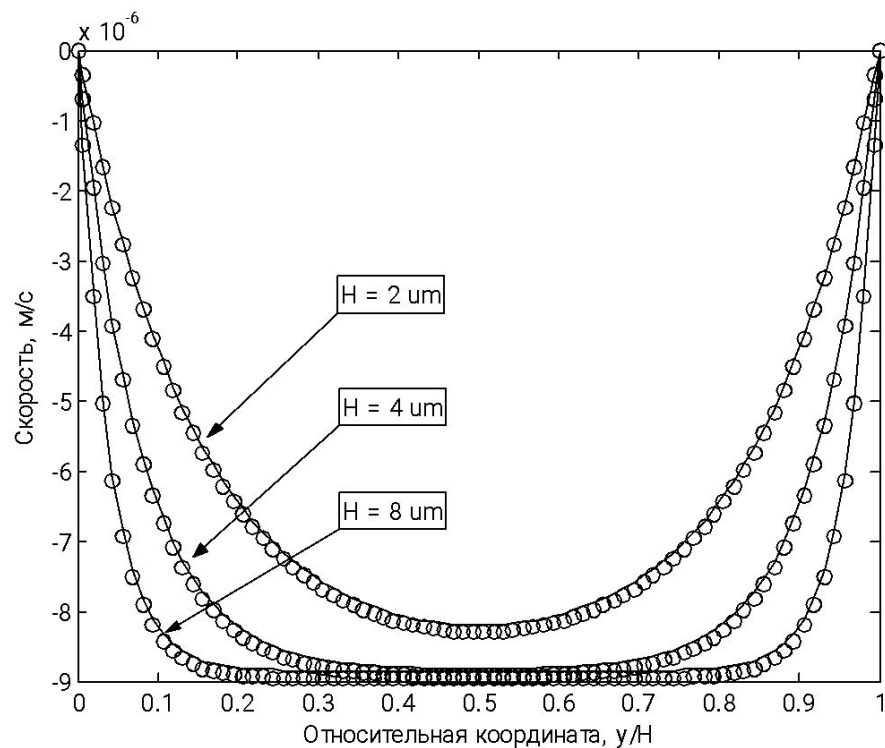
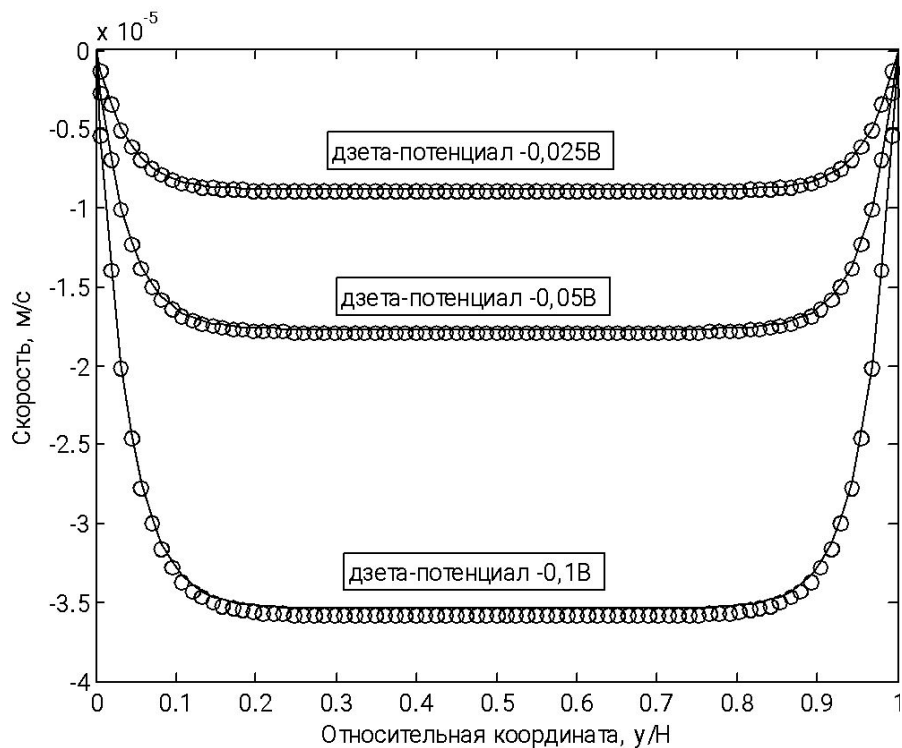
# Результаты моделирования. Массоперенос. Однородное распределение потенциала на пластинах.



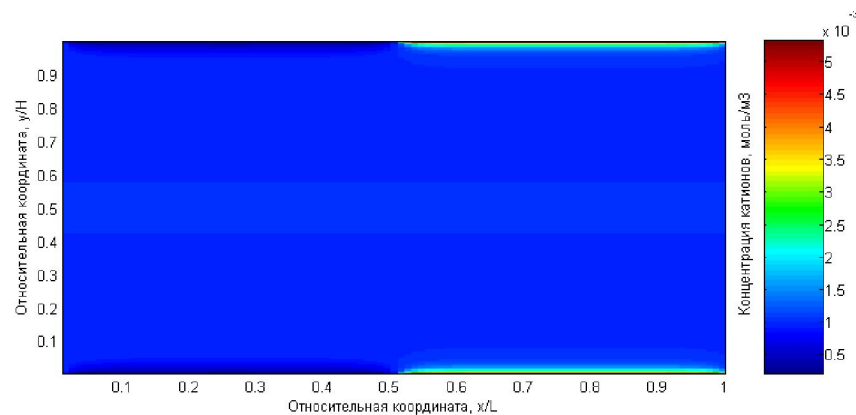
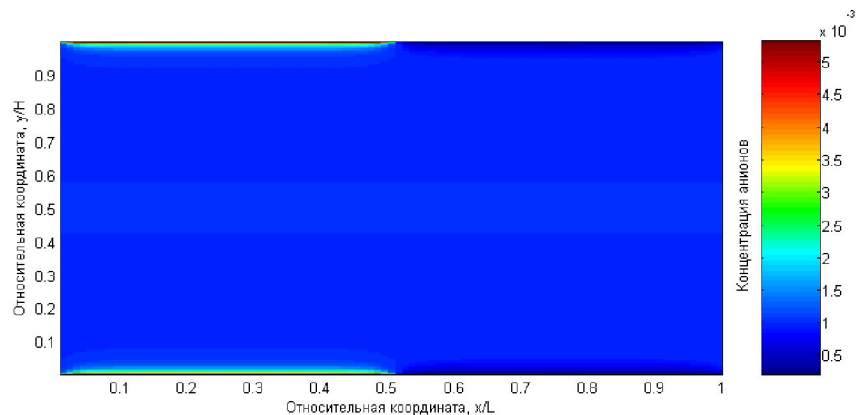
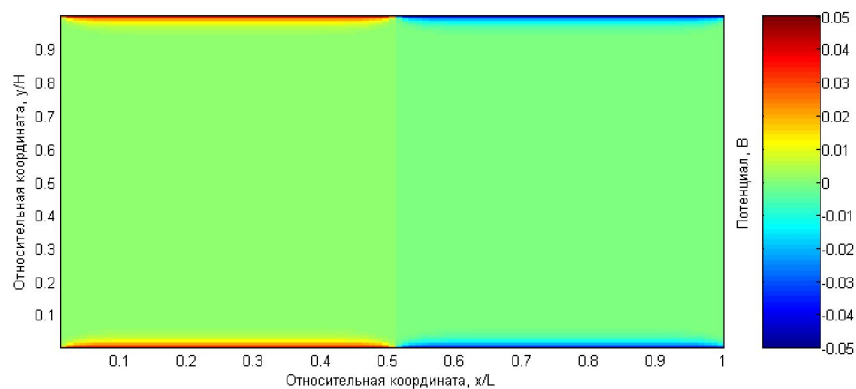
# Результаты моделирования. *Массоперенос. Неоднородное распределение потенциала на пластинах.*



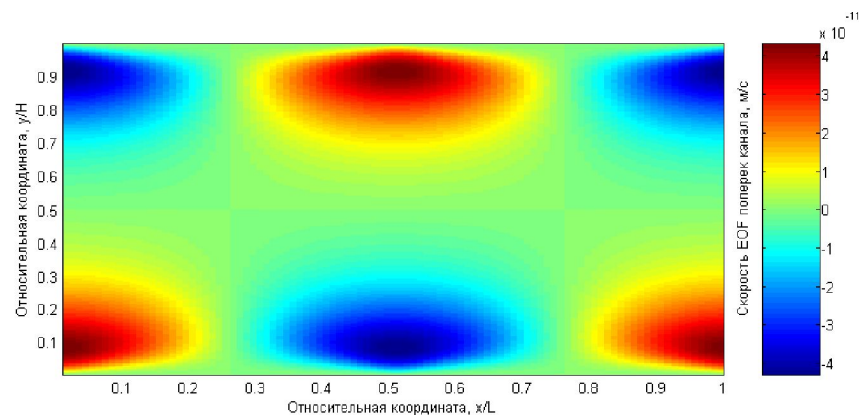
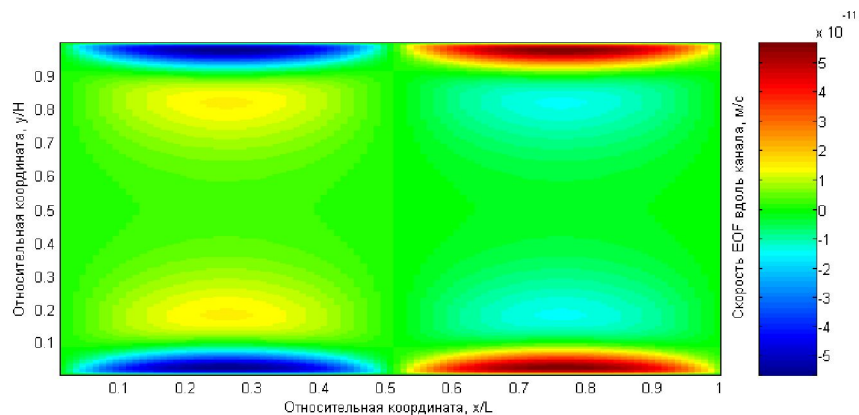
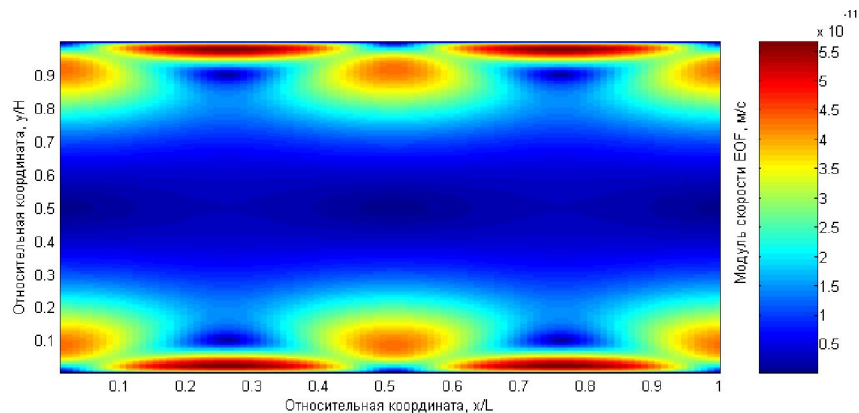
**Результаты моделирования.** Электроосмос. Однородное распределение потенциала на пластинах. Распределение скорости EOF.



**Результаты моделирования.** Электроосмос. Неоднородное распределение потенциала на пластинах. Распределение потенциала и концентрации ионов.



**Результаты моделирования.** *Электроосмос. Однородное распределение потенциала на пластинах. Распределение скорости EOF.*



# Заключение. Выводы.

- Была разработана и реализована численная модель электрокинетического переноса в неоднородных системах на основе решёточных методов (LBM, LPM, LCDM).
- Была проверена адекватность построенной модели.





Спасибо за внимание