УДК 517.91+541.13

КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ПЛОТНОСТИ ТОКА В ОБЛАСТИ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ЗАРЯДА

Уртенов К. М.[1]***, Коваленко А. В.***[2]***, Чубырь Н. О.***[3]***, Хромых А. А.***[4]

BOUNDARY PROBLEM FOR CURRENT DENSITY IN THE SPACE CHARGE AREA

Urtenov K. M., Kovalenko A. V., Chubyr N. O., Khromyh A. A.

In this work we formulated automodelling decision for marginal task for current density in the sphere of space charge. Method of subsequent approximations for numeric calculation is offered, specific characteristic of this method is reduction of the equation for current approximation to the canonical structure, based on previous approximation.

Keywords: boundary-value problem, Nernst–Plank–Puasson equations system, method of subsequent approximation

Ряд задач нанотехнологий, например, моделирование электрофореза, мембранной электрохимии (моделирование тепломассопереноса в камере обессоливания электродиализного аппарата) приводят к краевым задачам для системы двумерных уравнений Нернста–Планка и Пуассона, исследованию, которых посвящено много работ [1–3]. Однако авторы этих работ в основном ограничиваются исследованием либо одномерных уравнений Нернста–Планка и Пуассона, либо уравнений Нернста–Планка совместно с условием электронейтральности. Объясняется это главным образом математическими трудностями исследования процессов тепломассообмена в области пространственного заряда. В данной работе предлагаются эффективные математические методы исследования этих процессов.

1. Постановка задачи

В [4] выведено новое уравнение для функции $\eta\,(x,y)$, определены плотность тока в области пространственного заряда, и соответствующие краевые условия. В области пространственного заряда, примыкающей к катионообменной мембране в камере обессоливания электродиализатора, это уравнение для стационарного гальваностатического режима в безразмерных переменных является квазилинейным дифференциальным уравнением в частных производных параболического типа и имеет вид

$$\eta_y^2\eta_{xx} - 2\eta_x\eta_y\eta_{xy} + \eta_x^2\eta_{yy} = \\ = -\frac{1}{2S}(S_x\eta_x + S_y\eta_y)(\eta_x^2 + \eta_y^2), \quad (1.1)$$

где $S(x,y)$ — заданная функция, а $\eta(x,y)$ — искомая, причем $\eta_y = -I_1$, $\eta_x = I_2$, и вектор $\mathbf{I} = (I_1, I_2)$ описывает плотность тока, $x \in (0, x_p)$, $y \in (0, L)$.

Ось ординат $x = 0$ соответствует межфазной границе раствор / катионообменная мембрана, $x = x_p$ соответствует условной границе пространственного заряда (в общем случае $x_p = x_p(y)$).

Граничные условия на входе ($y = 0$) и выходе ($y = L$) камеры обессоливания могут быть различными, например, могут задаваться значения функции

$$\eta(x,y)\,|_{y=0} = \eta_n(x), \quad \eta(x,y)\,|_{y=L} = \eta_k(x).$$

[1]Уртенов Кирилл Махаметович, аспирант кафедры физики Кубанского государственного технологического университета; e-mail: urtenov@km.ru

[2]Коваленко Анна Владимировна, кандидат экономических наук, доцент кафедры прикладной математики Кубанского государственного университета; e-mail: savanna-05@mail.ru

[3]Чубырь Наталья Олеговна, старший преподаватель кафедры прикладной математики Кубанского государственного технологического университета; e-mail: chubyr-natalja@rambler.ru

[4]Хромых Анна Алексеевна, старший преподаватель кафедры прикладной математики Кубанского государственного технологического университета; e-mail: AnnXA@mail.ru.

При гальваностатическом режиме ток, протекающий через любое сечение камеры обессоливания, является постоянным, т. е. для любого x

$$i_{cp} = \frac{1}{L}\int\limits_0^L I_1(x,y)dy = \text{const},$$

откуда следует, что

$$\eta|_{y=0} = 0, \quad \eta|_{y=L} = -i_{cp}L, \tag{1.2}$$

где i_{cp} — средний ток.

В зависимости от целей исследования можно использовать различные граничные условия при $x=0$ и $x=x_p$, например,

$$\eta(x,y)\,|_{x=0} = \eta_0(y), \quad \eta(x,y)\,\big|_{x=x_p} = \eta_p(y).$$

Можно также принять условие перпендикулярности плотности тока к поверхности мембраны при $x=0$ и в области электронейтральности, которая начинается с $x=x_p$, что приводит к условиям

$$\left.\frac{\partial\eta}{\partial x}\right|_{x=0} = 0, \quad \left.\frac{\partial\eta}{\partial x}\right|_{x=x_p} = 0. \tag{1.3}$$

Возможны комбинации приведенных условий.

2. Автомодельные решения

Будем искать автомодельное решение в виде $\eta = u(\xi)$, где $\xi(x,y)$ — некоторая функция.

Введем обозначения

$$\mathcal{L}(\eta) = \eta_y^2\eta_{xx} - 2\eta_x\eta_y\eta_{xy} + \eta_x^2\eta_{yy},$$

$$P(S,\eta) = -\frac{1}{2S}(\operatorname{grad} S, \operatorname{grad}\eta)\,\|\operatorname{grad}\eta\|^2\,,$$

тогда

$$\mathcal{L}(\eta) = \mathcal{L}\,(u(\xi)) = u'^3\mathcal{L}(\xi),$$

$$P\big(S, u(\xi(x,y))\big) = \\ = -\frac{u'^3}{2S}(\operatorname{grad} S, \operatorname{grad}\xi)\,\|\operatorname{grad}\xi\|^2\,.$$

Таким образом, уравнение (1.1) для ξ для любой функции $u \in C^2$ можно записать в виде

$$\mathcal{L}(\xi) = P(s,\xi).$$

Действительно, $\mathcal{L}\,(u(\xi)) = u'^3\mathcal{L}(\xi)$, $P\,(S,u(\xi)) = u'^3P(S,\xi)$. Следовательно $u'^3L(\xi) = u'^3P(S,\xi)$. Если $u' \neq 0$, то $\mathcal{L}(\xi) = P(S,\xi)$ для любой $u \in C^2$.

Построим автомодельное решение, предполагая, что заданная функция $S(x,y)$ — линейная, т. е. $S(x,y) = Ax + By + C$.

Положим $\xi(x,y) = Bx - Ay + C$. Так как, $(\operatorname{grad} S, \operatorname{grad}\xi) = 0$, то $P(S,\xi) = 0$.

Из линейности функции $\xi(x,y)$ следует, что $\mathcal{L}(\xi) = 0$. Таким образом, $\xi(x,y)$ является решением уравнения $\mathcal{L}(\xi) = P(S,\xi)$. Следовательно, для любой $u \in C^2$ функция $\eta(x,y) = u\,(Bx - Ay + C)$ является решением уравнения $\mathcal{L}(\eta) = P(S,\eta)$.

Выбирая вид функции $u\,(\xi)$ можно получить различные решения уравнения (1.1). Полученные автомодельные решения можно использовать для тестовых расчетов, а также в качестве начальных приближений в методе последовательных приближений.

Пусть функция $S(x,y)$ имеет вид:

$$S(x,y) = i_{cp}x + \alpha_0 y + \gamma,$$

где $\alpha_0 < 0$ и γ — произвольно малые числа. Возьмем в качестве $\eta(x,y)$ линейную функцию $\eta(x,y) = \alpha_0 x - i_{cp}y$. Эта функция приближенно удовлетворяет всем граничным условиям для $\eta(x,y)$

$$\eta(x,y)\,|_{y=0} = \alpha_0 x \approx 0,$$
$$\eta(x,y)\,|_{y=L} = \alpha_0 x - i_{cp}L \approx -i_{cp}L,$$
$$\eta_x(x,y)\,|_{x=0} = \alpha_0 \approx 0,$$
$$\eta_x(x,y)\,\big|_{x=x_p} = \alpha_0 \approx 0.$$

Так как $(\operatorname{grad} S, \operatorname{grad}\eta) = i_{cp}\alpha_0 - \alpha_0 i_{cp} = 0$, предложенная функция $\eta(x,y)$ является приближенным решением краевой задачи (1.1)–(1.3).

3. Метод последовательных приближений

Для численного решения краевой задачи предлагается использовать метод последовательных приближений.

Пусть $\eta^{(0)}\,(x,y)$ — некоторое начальное приближение и уже построены приближения порядка $1, 2, \ldots, k$. Определим $k+1$ приближение, как решение уравнения

$$\left(\eta_y^{(k)}\right)^2\eta_{xx} - 2\eta_x^{(k)}\eta_y^{(k)}\eta_{xy} + \left(\eta_x^{(k)}\right)^2\eta_{yy} = \\ = -\frac{1}{2S}(S_x\eta_x^{(k)} + S_y\eta_y^{(k)})\times \\ \times\left((\eta_x^{(k)})^2 + (\eta_y^{(k)})^2\right), \tag{3.1}$$

с соответствующими граничными условиями. Представим

$$\mathcal{L}_k(\eta)=\left(\eta_y^{(k)}\right)^2\eta_{xx}-2\eta_x^{(k)}\eta_y^{(k)}\eta_{xy}+$$
$$\left(\eta_x^{(k)}\right)^2\eta_{yy}=a_k\eta_{xx}-2b_k\eta_{xy}+c_k\eta_{yy}.$$

Операторы $\mathcal{L}_k(\eta)$ являются параболическими дифференциальными операторами второго порядка для любого k, так как

$$a_kc_k-b_k^2=\left(\eta_y^{(k)}\right)^2\left(\eta_x^{(k)}\right)^2-\left(\eta_x^{(k)}\eta_y^{(k)}\right)^2=0.$$

Введем замену переменных

$$\begin{gathered}\eta(x,y)=V(\theta,\xi),\\ \xi=\eta^{(k)}(x,y),\\ \theta=x,\end{gathered}\qquad(3.2)$$

Такая замена приводит оператор $\mathcal{L}_k(V)$ к каноническому виду, т. е. замена переменных с использованием предыдущего приближения $\eta^{(k)}(x,y)$ приводит уравнение для следующего приближения $\eta^{(k+1)}(x,y)$ к каноническому виду. Таким образом, уравнение (3.1) в новых переменных (3.2) примет вид

$$\left(\eta_y^{(k)}\right)^2V_{\theta\theta}+L_k\left(\eta^{(k)}\right)V_\xi=f_k,\qquad(3.3)$$

где

$$f_k=$$
$$=-\frac{1}{2\bar{S}}\left[\bar{S}_\xi\left(\left(\eta_x^{(k)}\right)^2+\left(\eta_y^{(k)}\right)^2\right)+\bar{S}_\theta\eta_x^{(k)}\right]\times$$
$$\times\left(\left(\eta_x^{(k)}\right)^2+\left(\eta_y^{(k)}\right)^2\right).$$

$$S(x,y)=\bar{S}(\theta,\xi).$$

К этому уравнению нужно добавить соответствующие краевые условия.

Численное решение краевой задачи для уравнения (3.3) не вызывает затруднений, а ее точное решение даже для первого приближения возможно для частных случаев функции $S(x,y)$, а также при специальном выборе начального приближения $\eta^{(0)}(x,y)$.

Рассчитаем первое приближение $\eta^{(1)}(x,y)$, выбрав в качестве $\eta^{(0)}(x,y)$ линейную функцию, приближенно удовлетворяющую краевым условиям $\eta^{(0)}(x,y)=\alpha_0x-i_{cp}y$, где α_0, как и прежде, достаточно малое отрицательное число, однако здесь в отличие от предыдущего пункта функция $S(x,y)$ не предполагается линейной, а следовательно $\eta^{(0)}(x,y)$ не будет автомодельным решением.

Заметим, что замена переменных $\xi=$ $=\eta^{(0)}(x,y)=\alpha_0x-i_{cp}y$, $\theta=x$, невырожденная для любого α_0.

В силу линейности $\eta^{(0)}(x,y)$

$$\mathcal{L}_0\left(\eta^{(0)}\right)=0.$$

Тогда уравнение (3.3) примет вид

$$i_{cp}^2V_{\theta\theta}=-\frac{(\alpha_0^2+i_{cp}^2)}{2\bar{S}}\left((\alpha_0^2+i_{cp}^2)\bar{S}_\xi+\bar{S}_\theta\alpha_0\right).$$

Дважды интегрируя его по θ получим

$$V(\theta,\xi)=W(\theta,\xi)+C_1(\xi)\theta+C_2(\xi),$$

где $C_1(\xi)$ и $C_2(\xi)$ произвольные функции, подлежащие определению с использованием краевых условий,

$$W_=-\frac{\left(\alpha_0^2+i_{cp}^2\right)^2}{2i_{cp}^2}\int_0^\theta\frac{(\theta-\tau)\bar{S}_\xi(\tau,\xi)d\tau}{\bar{S}(\tau,\xi)}-$$
$$-\frac{\alpha_0(\alpha_0^2+i_{cp}^2)}{2i_{cp}^2}\int_0^\theta\ln\bar{S}(\tau,\xi)d\tau.$$

Возвращаясь к старым переменным, имеем

$$\begin{aligned}\eta(x,y)&=V(x,\,\alpha_0x-\,i_{cp}y)=\\&=W(x,\alpha_0x-i_{cp}y)+\\&+C_1(\alpha_0x-i_{cp}y)x+C_2(\alpha_0x-i_{cp}y).\end{aligned}$$

Воспользуемся условиями (1.2) для определения C_1 и C_2. Из условия $\eta|_{y=0}=0$ следует

$$C_1(\alpha_0x)x+C_2(\alpha_0x)=-W(x,\alpha_0x)$$

или

$$C_1(u)\frac{u}{\alpha_0}+C_2(u)=-W\left(\frac{u}{\alpha_0},u\right).\qquad(3.4)$$

Из условия $\eta|_{y=L}=-i_{cp}L$

$$\begin{aligned}C_1(\alpha_0x-i_{cp}L)x+C_2(\alpha_0x-i_{cp}L)&=\\=-W(x,\alpha_0x-i_{cp}L)\end{aligned}$$

или

$$C_1(u)\left(\frac{u}{\alpha_0}+\frac{i_{cp}L}{\alpha_0}\right)+C_2(u)=$$
$$=-W\left(\frac{u}{\alpha_0}+\frac{i_{cp}}{\alpha_0},u\right).\qquad(3.5)$$

Решая совместно уравнения (3.4), (3.5) получим

$$C_1(u) = \frac{\alpha_0}{i_{cp}}\left(W\left(\frac{u}{\alpha_0}, u\right) - \right.$$
$$\left. - W\left(\frac{u}{\alpha_0} + \frac{i_{cp}}{\alpha_0}, u\right)\right),$$

$$C_2(u) = \frac{u}{i_{cp}} W\left(\frac{u}{\alpha_0} + \frac{i_{cp}}{\alpha_0}, u\right) -$$
$$- \left(1 + \frac{u}{i_{cp}}\right) W\left(\frac{u}{\alpha_0}, u\right).$$

Таким образом

$$\eta(x, y) = V(x, \alpha_0 x - i_{cp} y) =$$
$$= W(x, \alpha_0 x - i_{cp} y) +$$
$$\frac{\alpha_0}{i_{cp}}\left(W\left(\frac{\alpha_0 x - i_{cp} y}{\alpha_0}, \alpha_0 x - i_{cp} y\right) - \right.$$
$$\left. - W\left(\frac{\alpha_0 x - i_{cp} y}{\alpha_0} + \frac{i_{cp}}{\alpha_0}, \alpha_0 x - i_{cp} y\right)\right) x +$$
$$+ \frac{\alpha_0 x - i_{cp} y}{i_{cp}} \times$$
$$\times W\left(\frac{\alpha_0 x - i_{cp} y}{\alpha_0} + \frac{i_{cp}}{\alpha_0}, \alpha_0 x - i_{cp} y\right) -$$
$$- \left(1 + \frac{\alpha_0 x - i_{cp} y}{i_{cp}}\right) \times$$
$$\times W\left(\frac{\alpha_0 x - i_{cp} y}{\alpha_0}, \alpha_0 x - i_{cp} y\right).$$

Ввиду громоздкости этой формулы возникает необходимость нахождения более простого аналитического приближенного решения. Функцию $V(x, y)$ можно упростить с учетом того, что α_0 — мало по сравнению с i_{cp}. Положив $\alpha_0^2 + i_{cp}^2 \approx i_{cp}^2$, функцию $V(x, y)$ можно представить

$$V = -\frac{i_{cp}^2}{2} \int_0^\theta \frac{(\theta - \tau)\bar{S}_\xi(\tau, \xi) d\tau}{\bar{S}(\tau, \xi)} -$$
$$- \frac{\alpha_0}{2} \int_0^\theta \ln \bar{S}(\tau, \xi) d\tau + C_1(\xi)\theta + C_2(\xi).$$

Для дальнейших упрощений необходимо аппроксимировать функцию $S(x, y)$ простыми функциями.

Исследование области пространственного заряда вблизи анионообменной мембраны проводится аналогично с очевидными изменениями.

Построенные выше автомодельное решение и метод последовательных приближений позволяют эффективно находить точные и приближенные численные и аналитические решения для плотности тока в области пространственного заряда, что дает возможность построения и исследования двумерных математических моделей процесса тепломассопереноса, описываемых уравнениями Нернста–Планка и Пуассона, например, процесса тепломассопереноса в канале обессоливания электродиализного аппарата, электрофореза и т. д.

Литература

1. *Бабешко В. А., Заболоцкий В. И., Кириллова Е. В. Уртенов М. Х.* Декомпозиция систем уравнений Нернста–Планка–Пуассона // ДАН. 1995. Т. 344, №3. С. 485–487.
2. *Заболоцкий В. И., Никоненко В. В.* Перенос ионов в мембранах. М.: Наука, 1996. 392 с.
3. *Волгин В. М., Давыдов А. Д.* Естественноконвективная неустойчивость электрохимических систем // Электрохимия. 2006. Т. 42, №6. С. 635–678.
4. *Лаврентьев А. В., Уртенов К. М., Хромых А. А., Чубырь Н. О.* Полная декомпозиция неодномерной системы уравнений Нернста–Планка–Пуассона для бинарного электролита // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2009. №2. С. 32–37.

Ключевые слова: краевая задача, система уравнений Нернста–Планка и Пуассона, метод последовательных приближений

Статья поступила 17 марта 2010 г.
Кубанский государственный технологический университет, г. Краснодар
Кубанский государственный университет, г. Краснодар