

**0.1. Франц Е.А., Крылов А.А., Демехин Е.А. Математическое моделирование электрофореза в полярных и неполярных электролитах**

Рассматривается задача электрофореза диэлектрической частицы, которая описывается системой нелинейных уравнений в частных производных: уравнения Нернста —Планта для переноса ионов, уравнение Стокса для течения жидкости и уравнение Пуассона для распределения потенциала. Численное решение задачи основано на методе конечных разностей. Особенностью задачи является наличие тонких пограничных слоев для случая бинарного электролита, что приводит к появлению малого параметра - числа Дебая при старшей производной в уравнении Пуассона.

Для пространственной дискретизации уравнений используется метод конечных разностей второго порядка точности. В соответствии со стандартной схемой смещенной сетки все скалярные величины ( $c^+$ ,  $c^-$ ,  $\Phi$ ) определяются в центрах вычислительных ячеек, а компоненты скорости  $U$  и  $V$  определяются на гранях ячеек. Сетка растягивается в направлении, нормальном к поверхности частицы, чтобы обеспечить необходимое количество узлов в тонком двойном электрическом слое (ДЭС). Эта сетка была построена с использованием экспоненциального растяжения, гарантируя, что в ДЭС присутствует не менее нескольких десятков узлов. Вдоль углового направления использовалась обычная равномерная сетка.

Нелинейные члены в системе уравнений записаны с использованием центральной разностной схемы второго порядка точности. Такая пространственная дискретизация приводит к жесткой системе уравнений и поэтому требует использования неявных методов. Однако использование полностью неявных методов существенно увеличивает время вычислений. Поэтому был использован полунеявный метод, в котором неявно представлена только часть оператора, а именно схема Рунге-Кутты третьего порядка точности. Данный подход основан на работах Никитина [1, 2], в которых он использован для решения уравнений Навье-Стокса.

До настоящего времени не рассматривался универсальный подход для численного моделирования этой задачи без наложения ограничений на напряженность электрического поля, плотность поверхностного заряда и длину Дебая. Основная причина заключается в том, что дискретизация системы уравнений, которая учитывает тонкие пограничные слои, где происходят быстрые изменения неизвестных функций, приводит к жесткой задаче, что создает проблемы для получения точных и устойчивых численных решений. В результате традиционные численные методы, такие как явные схемы с интегрированием по времени, могут требовать чрез-

вычайно малых временных шагов для поддержания устойчивости, что приводит к чрезмерным вычислительным затратам. Полунеявные методы предлагают компромисс между явными и неявными схемами с временным шагом, часто обеспечивая лучшую устойчивость и эффективность. Они могут помочь снизить вычислительную сложность и временной шаг, поскольку включают меньше неизвестных или более простую систему уравнений. Они также могут обеспечить лучшую устойчивость и особенно выгодны для задач с умеренной жесткостью или когда только определенные компоненты системы проявляют жесткость. В целом, полунеявные методы часто проще в реализации и требуют меньшего опыта в численных методах и могут быть разработаны для обработки быстрой и медленной динамики отдельно, что может привести к более точному представлению поведения системы без необходимости в чрезвычайно малых шагах интегрирования.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 24-79-00129).*

**Список литературы**

- [1] NIKITIN N. V. Third-order-accurate semi-implicit Runge-Kutta scheme for incompressible Navier-Stokes equations // Int. J. Numer. Meth. Fluids. 2006. Vol. 51. P. 221-233
- [2] NIKITIN N. V. Finite-difference method for incompressible Navier-Stokes equations in arbitrary orthogonal curvilinear coordinates // Journal of Computational Physics. 2006. Vol. 217. P. 759-781.