

Электронный научный журнал "Математическое моделирование, компьютерный и натурный эксперимент в естественных науках" <http://mathmod.esrae.ru/>

URL статьи: mathmod.esrae.ru/37-133

Ссылка для цитирования этой статьи:

Садохин Д. А. Моделирование движения иона металла в вязкой жидкости с параболическим фронтом скоростей течения в трубе круглого профиля в однородном стационарном магнитном поле // Математическое моделирование, компьютерный и натурный эксперимент в естественных науках. 2022. №1

УДК 532.771

DOI: 10.24412/2541-9269-10.24412/2541-9269-2022-1-13-21

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ИОНА МЕТАЛЛА В ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ С ПАРАБОЛИЧЕСКИМ ФРОНТОМ СКОРОСТЕЙ ТЕЧЕНИЯ В ТРУБЕ КРУГЛОГО ПРОФИЛЯ В ОДНОРОДНОМ СТАЦИОНАРНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Садохин Д.А.

Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ»
(Московский инженерно-физический институт), Россия, Москва,
werkenPost@yandex.ru

THE MODELLING OF METAL ION'S MOVEMENT IN VISCOUS LIQUID WITH PARABOLIC VELOCITY'S FRONT OF FLOW IN THE PIPE OF ROUND PROFILE IN THE HOMOGENOUS STATIONARY MAGNETIC FIELD

Sadokhin D. A.

National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics
Institute), Russia, Moscow, werkenPost@yandex.ru

Аннотация: в рамках определения влияния магнитного поля на водоподготовку в работе приведено дифференциальное уравнение движения иона металла в вязкой жидкости (воде) и его численное решение методом Рунге-Кутты. Разработаны рекомендации по нахождению решений данного уравнения для случая сольватации.

Ключевые слова: гидратация, вязкость, ламинарный режим, метод Рунге-Кутты.

The abstract: there are given a differential equation of metal ion's movement in viscous liquid (water) and its numeral solution with Runge-Kutta method. Recommendations of solutions' finding are developed for the solvation case.

Key words: hydration, viscosity, laminar type of the flow, Runge-Kutta method.

Введение. Тема обработки воды магнитным полем долгое время была источником противоречий в научных кругах [1]. Причиной таких дебатов является отсутствие исчерпывающих статистических и экспериментальных данных, кроме того, отсутствие математической модели происходящего процесса. Для устранения подобных недостатков в качестве объекта

исследования выберем предельно разбавленный водный раствор соли, что моделирует разбавление технической воды.

Сформулируем условие задачи: в трубе круглого сечения радиуса R наблюдается ламинарный изотермический режим течения воды кинематической вязкостью μ и динамической вязкостью η , плотностью ρ с максимальной скоростью среды v_{max} . В жидкости движется ион металла заряда q , радиуса r и массой m , в начальный момент находящийся на оси трубы. Система находится в стационарном однородном неограниченном в пространстве магнитном поле с индукцией \vec{B} , перпендикулярной скорости иона. Найти траекторию иона.

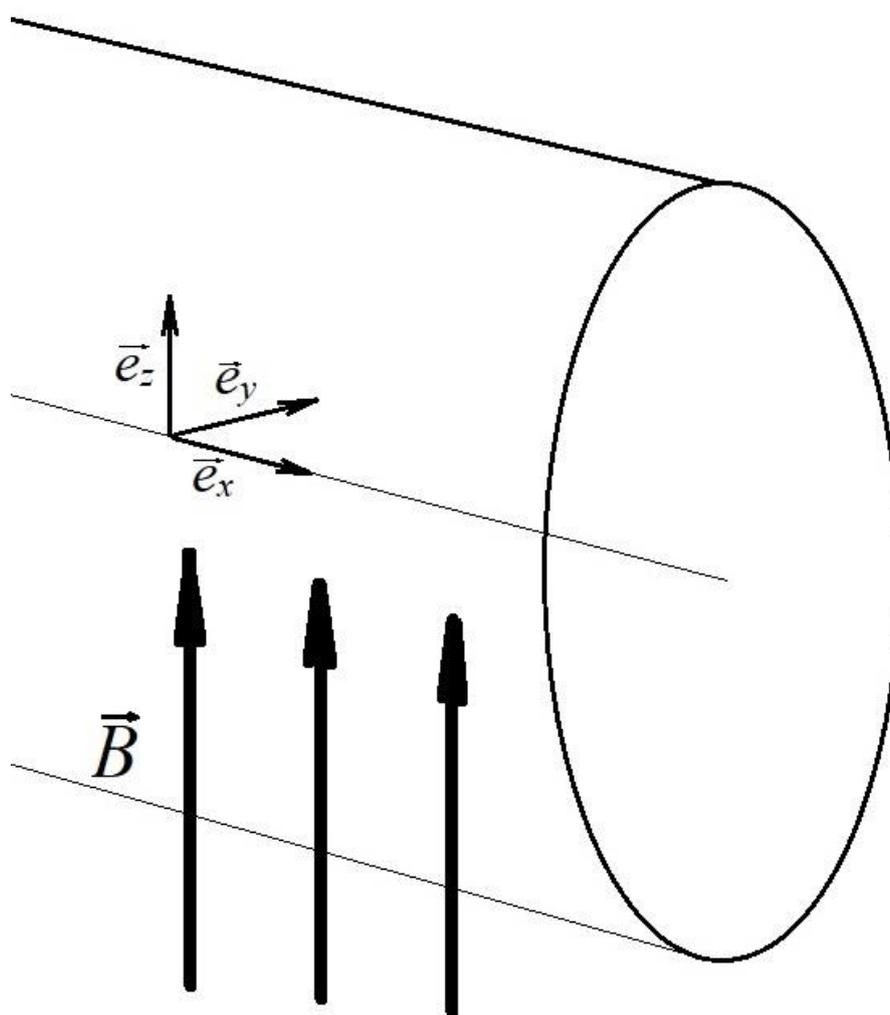


Рис. 1. Система координат

Оценка характера сил сопротивления. Зависимость силы сопротивления определяется числом Рейнольдса [2]:

$$Re_{max} = \frac{v_{max1}r}{\mu} \quad (1)$$

Где v_{max1} – максимальная скорость иона.

При оценке порядка отношения r/μ учтем, что порядок кинематической вязкости для воды составляет $10^6 \text{ м}^2\text{с}^{-1}$ [3], а радиус иона металла – 10^{-10} м [4]. При подобных значениях число Рейнольдса зависит от скорости иона и всякий раз удовлетворяет условию:

$$Re \ll 1$$

Что свидетельствует о справедливости формулы Стокса (линейного характера зависимости силы от относительной скорости) для сил сопротивления среды:

$$F = -6\pi r\eta v_{\text{отн}} \quad (2)$$

Уравнения движения частицы. Зададим правую тройку координат следующим образом:

Тогда сила Лоренца определяется как:

$$F_L = q \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ v_x & v_y & 0 \\ 0 & 0 & B \end{vmatrix} = q(\mathbf{e}_x v_y B - \mathbf{e}_y v_x B) \quad (3)$$

Так как скорость иона перпендикулярна магнитному полю, возможно ограничиться рассмотрением случая плоского движения (иначе говоря, решать поставленную задачу в двумерном координатном пространстве). Задача медленного течения вязкой жидкости в трубах круглого сечения хорошо известна, закон плоского распределения скоростей рассматривается в плоскости xOy ($z=0$) и носит следующий характер:

$$v_{\text{жидкости}}(y) = v_{\text{max}} \left(1 - \frac{y^2}{R^2} \right) \quad (4)$$

Это справедливо только потому, что движение исследуется на оси трубы ($z=0$) и ион двигаться в направлении z не может.

С учетом условий (1, 2, 3, 4) составим систему дифференциальных уравнений (ДУ) движения иона:

$$\begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = -\frac{6\pi r\eta}{m} (v_x - v_{\text{жидкости}}(y)) + \frac{qv_y B}{m} \\ \frac{dv_y}{dt} = -\frac{qv_x B}{m} - \frac{6\pi r\eta}{m} v_y \\ \frac{dy}{dt} = v_y \end{cases} \quad (5)$$

Введем для краткости постоянные:

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{6\pi r\eta}{m} \\ C_2 &= \frac{qB}{m} \\ C_3 &= C_1 v_{\text{max}} \\ C_4 &= \frac{C_3}{R^2} \end{aligned}$$

Тогда система (5) примет вид:

$$\begin{cases} v_x = -\frac{1}{C_2} \frac{d^2 y}{dt^2} - \frac{C_1}{C_2} \frac{dy}{dt} \\ \frac{dv_x}{dt} = -C_1 v_x + C_3 - C_4 y^2 + C_2 \frac{dy}{dt} \end{cases} \quad (6)$$

Из (6) получим нелинейное ДУ относительно:

$$\frac{d^3 y}{dt^3} = -2C_1 \frac{d^2 y}{dt^2} - (C_1^2 + C_2^2) \frac{dy}{dt} + C_2 C_4 y^2 - C_2 C_3 \quad (7)$$

Решение ДУ (7) предлагается получить методом Рунге-Кутта с контролем в виде пересчета по удвоенному шагу. Такая схема решения позволяет знать производные координаты y для каждого шага сетки времени, что позволяет решить первое уравнение системы (6) интегрируя его по времени следующим образом:

$$\int dx = -\frac{1}{C_2} \int dv_y - \frac{C_1}{C_2} \int dy \quad (8)$$

Интегрирование (8) дает:

$$x = -\frac{v_y}{C_2} - \frac{C_1}{C_2} y + const \quad (9)$$

Где $const$ – константа, полученная интегрированием трех выражений. По условию, ион имеет нулевые координаты и поперечную скорость в начальный момент времени, поэтому константа интегрирования представляет собой нулевую величину.

Как отмечалось ранее, по методу Рунге-Кутта, примененному к (7), могут быть получены координата y и ее первая производная по времени. Таким образом, подстановкой данных величин в (9) возможна установка зависимости $x(y)$, что является решением задачи.

Решение (7) возможно получить методом Рунге-Кутта при приведении его к однородному виду:

$$\frac{d^4 y}{dt^4} = -2C_1 \frac{d^3 y}{dt^3} + (C_1^2 + C_2^2) \frac{d^2 y}{dt^2} + 2C_2 C_4 y \frac{dy}{dt} \quad (10)$$

Пример численного решения. Пусть заданы следующие начальные условия, позволяющие произвести оценку движения ионов большинства металлов в трубах радиуса порядка 10^{-2} м в магнитном поле порядка 1 Тл с осевой скоростью течения 1 мс^{-1} :

$$C_1 = 10^{13} \text{ с}^{-1}$$

$$C_2 = 10^{16} \text{ с}^{-1}$$

$$C_3 = 10^{13} \text{ мс}^{-2}$$

$$C_4 = 10^{17} \text{ м}^{-1} \text{ с}^{-2}$$

Решение (10) получено численно, как отмечалось, методом Рунге-Кутта [5] четвертого порядка точности для ДУ четвертого порядка. Для решения составлена программа на языке Си (см. Приложение 1).

На основании данных программы получена следующая зависимость для траектории частицы:

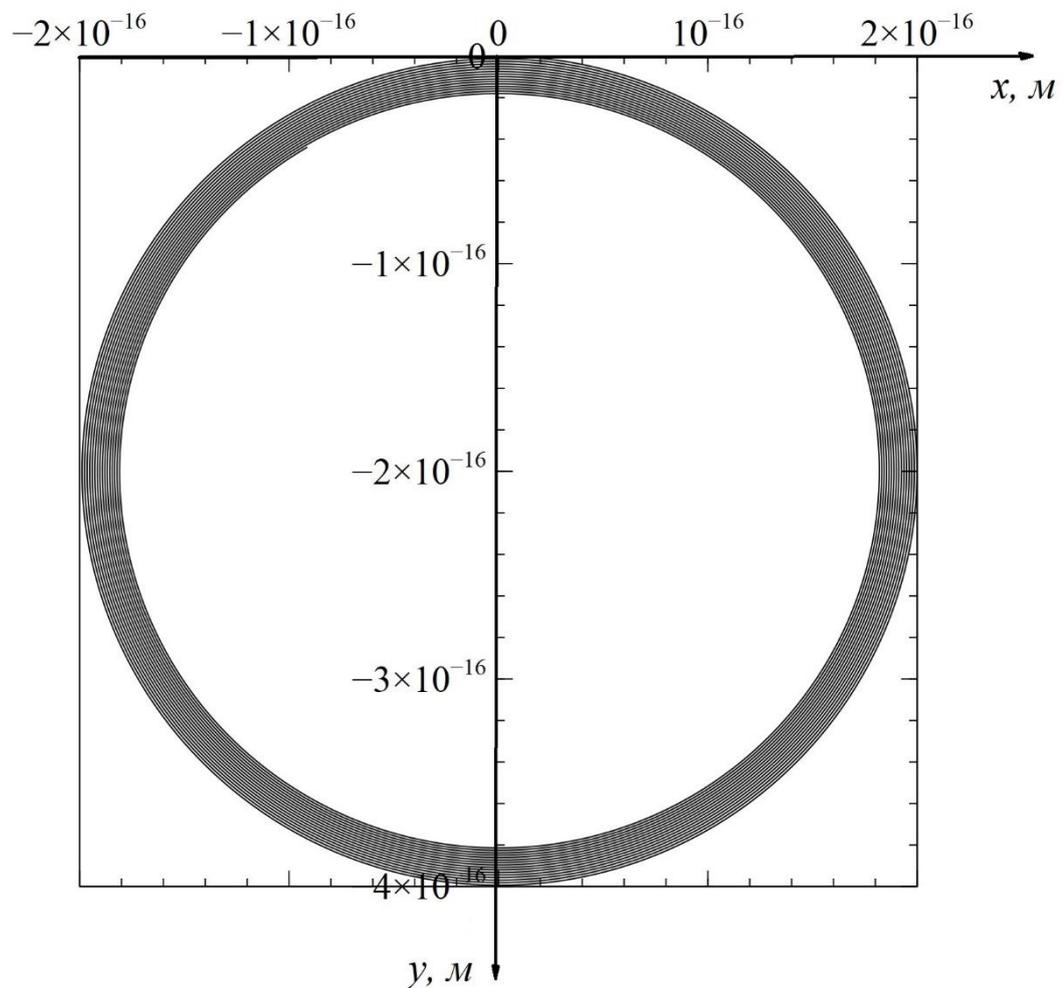


Рис. 2. График зависимости $y(x)$ для $1 \cdot 10^5$ итераций с шагом интегрирования $1 \cdot 10^{-19}$ с

Зависимость представляет спиралевидную функцию. Скорость частицы в результате диссипации уменьшается, что удовлетворяет закону сохранения энергии.

Шаг интегрирования подобран так, чтобы достигалась достаточная точность. При изменении шага интегрирования H в два раза в коде программы возможно оценить расхождение. Задачам оценки шаг в $1 \cdot 10^{-19}$ с удовлетворяет.

Таблица 1
Контрольные значения вычислений по методу Рунге-Кутта

Номер итерации с одинарным шагом, i	С одинарным шагом y, m	Номер итерации с двойным шагом, i	С двойным шагом y, m
2	$-4.000 \cdot 10^{-22}$	1	$-4.000 \cdot 10^{-22}$
4	$-1.6000 \cdot 10^{-21}$	2	$-1.6000 \cdot 10^{-21}$
6	$-3.6000 \cdot 10^{-21}$	3	$-3.6000 \cdot 10^{-21}$
10^5-4	$-4.44123716 \cdot 10^{-17}$	$(10^5-4)/2$	$-4.44123716 \cdot 10^{-17}$
10^5-2	$-4.42281484 \cdot 10^{-17}$	$(10^5-2)/2$	$-4.42281484 \cdot 10^{-17}$
10^5	$-4.40445492 \cdot 10^{-17}$	$10^5/2$	$-4.40445492 \cdot 10^{-17}$

Из приведенных данных следует, что расхождение не наблюдается в восьмой значащей цифре.

Уточнения к методике расчета. Известно, что ионы в предельно разбавленном растворе полярного растворителя являются сольватированными. В частности, в водном растворе ионы являются гидратированными. Для правильного решения уравнения (10), следует учитывать массу гидратной оболочки и стоксовский радиус сольватированного (гидратированного) иона [6].

Массу иона для поставленной задачи следует определять по соотношению:

$$m_{iГ} = n_Г m(H_2O) + m_i \quad (11)$$

Где $n_Г$ – константа гидратации, $m(H_2O)$ – масса молекулы воды, m_i – масса иона.

К численному решению ДУ (10) возможно применение алгоритма суммирования Кэхэна, однако введение двойной точности позволяет минимизировать погрешность сложения. Также отдельной задачей является вычисление погрешностей метода Рунге-Кутта, что затрудняется высоким числом итераций.

Заключение. При решении поставленной задачи получены следующие результаты:

1. Выведено дифференциальное уравнение четвертого порядка движения иона в стационарном магнитном поле в вязкой жидкости.
2. Найдено методом Рунге-Кутта численное решение и представлен график траектории иона для $1 \cdot 10^5$ итераций с шагом интегрирования $1 \cdot 10^{-19}$ с.
3. Разработаны указания по совершенствованию методики расчета.

4. Доказано влияние магнитного поля на движение предельно разбавленных растворов в круглых трубах с параболическим фронтом скоростей.

Представленные данные ценны возможностью обобщения на случай реального попадания иона в область стационарного ограниченного в пространстве магнитного поля, что создает перспективы для экспериментальной проверки использования магнитного поля в водоподготовке.

Литература

1. Очков В. Ф. Вода и магнит // Водоочистка. Водоподготовка. Водоснабжение. 2011. № 10. С. 36-48.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. VI. Гидродинамика. 5-е изд. стереот. М.: Физматлит, 2001. 736 с.
3. Бобылёв В. Н. Физические свойства наиболее известных химических веществ: Справочное пособие. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2003. 24 с.
4. Краткий справочник физико-химических величин / Под редакцией К.П. Мищенко и А.А. Равделя, Л.: Химия, 1974. 200 с.
5. Л. Коллатц Численные методы решения дифференциальных уравнений. М.: Издательство иностранной литературы, 1953. 459 с.
6. Танганов Б.Б. О размерах гидратированных ионов (К проблеме опреснения морской воды) // Успехи современного естествознания. 2009. № 12. С. 25-26.

Приложение 1.

```
#define H 1E-19
#include <stdio.h>
double k(double a, double b, double c, double d);
int main (void)
{
double x, t, y, y1, y2, y3, v1, v2, v3, k1, k2, k3, k4, v11, v12, v13, v21, v22, v23,
v31, v32, v33, y0, t0;
int i;
t0=0;
y0=0;
y1=0;
y2=-2E16;
y3=4*1E29;
v1=H*y1;
v2=H*H*y2/2;
v3=y3*H*H*H/6;
for (i=1; i<=100000000; i++)
{
t=t0;
y=y0;
k1=k(6*v3/(H*H*H), 2*v2/(H*H), v1/H, y);
t=t0+H/2;
y=y0+0.5*v1+0.25*v2+0.125*v3+0.0625*k1;
v11=v1+v2+0.75*v3+0.5*k1;
v21=v2+1.5*v3+1.5*k1;
v31=v3+2*k1;
k2=k(6*v31/(H*H*H), 2*v21/(H*H), v11/H, y);
v12=v11;
v22=v21;
v32=v3+2*k2;
k3=k(6*v32/(H*H*H), 2*v22/(H*H), v12/H, y);
t=t0+H;
y=y0+v1+v2+v3+k3;
v13=v1+2*v2+3*v3+4*k3;
v23=v2+3*v3+6*k3;
v33=v3+4*k3;
k4=k(6*v33/(H*H*H), 2*v23/(H*H), v13/H, y);
t0=t0+H;
y0=y0+v1+v2+v3+(1.0/15.0)*(8*k1+4*k2+4*k3-k4);
v1=v1+2*v2+3*v3+0.2*(9*k1+6*k2+6*k3-k4);
v2=v2+3*v3+2.0*(k1+k2+k3);
v3=v3+(2.0/3.0)*(k1+2*k2+2*k3+k4);
}
```

```
x=-1E-16*v1/H-1E-3*y;  
printf ("t = %.15f vx = %.20f vy = %.20f x = %.20f y = %.20f\n", t, (-  
2*v2/(H*H*1E16)-1E-3*v1/H), v1/H, x, y);  
}  
}  
double k(double a, double b, double c, double d) {  
    return (H*H*H*H*((-2E13*a)-1E32*b+1E33*c*d)/24.0);  
}
```