

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

URL статьи: mathmod.esrae.ru/43-172

Ссылка для цитирования этой статьи:

Садохин Д. А., Ходырев И. Е. Модель движения гидратированного иона в круглой трубе с ламинарным течением с учетом радиационного трения. // Математическое моделирование, компьютерный и натурный эксперимент в естественных науках. 2023. №3

УДК 004.942

DOI:10.24412/2541-9269-2023-3-02-07

МОДЕЛЬ ДВИЖЕНИЯ ГИДРАТИРОВАННОГО ИОНА В КРУГЛОЙ ТРУБЕ С ЛАМИНАРНЫМ ТЕЧЕНИЕМ С УЧЕТОМ РАДИАЦИОННОГО ТРЕНИЯ.

Садохин Д. А., Ходырев И. Е.

Федеральное Государственное Автономное Образовательное Учреждение
Высшего Образования Национальный Исследовательский Ядерный
Университет «МИФИ» (Московский инженерно-физический институт), Россия,
Москва, werkenPost@yandex.ru

THE MODEL OF HYDRATED ION'S MOVEMENT IN THE ROUND PIPE WITH LAMINAR FLOW INCLUDING RADIATION FRICTION

Sadokhin D. A, Khodyrev I. E.

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

Аннотация. В работе рассмотрена математическая модель движения заряженных частиц, содержащая нелинейное дифференциальное уравнение пятого порядка, подлежащее численному решению. Создана и представлена схема решения таких уравнений по методу Рунге-Кутты. Обобщены экспериментальные данные, интересные при рассмотрении движения ионов. Работа содержит отображенные графически участки траекторий для ионов натрия, калия и хлора.

Ключевые слова: моделирование, метод Рунге-Кутты, нелинейное дифференциальное уравнение.

The Abstract. The mathematical model of charged particles movement, which holds non-linear differential equation of the fifth order subjected to numerical solving, is considered in the study. The scheme of such equations solving according to Runge-Kutta is developed and represented. The experimental data that is interesting while considering the ions movement is generalized. The study holds parts of sodium, potassium and chlorine's trajectories represented graphically.

Key words: modelling, Runge-Kutta method, non-linear differential equation.

Введение. Известно [4], что сила радиационного трения (СРТ) пропорциональна рывку (третьей производной координаты по времени). При попадании иона в магнитное поле движение будет являться ускоренным в

результате действия магнитной составляющей силы Лоренца. Таким образом, движение будет затухающим.

Следствием эффекта гидратации является увеличение стоксовского радиуса и массы частицы, что отдельным образом сказывается на характере трения. Для течений с профилем параболоида, в частности, возникающих в круглых трубах с ламинарным режимом, получены численно траектории частиц [5]. Для уточнения модели следует внести поправку на излучение.

Сформулируем условие задачи: по оси круглой трубы радиуса R с ламинарным режимом течения движется ион со скоростью v_{max} (параллельно оси). Ион попадает в стационарное однородное магнитное поле с индукцией B . Известна масса m , заряд q и стоксовский радиус r_{st} иона. Среда в трубе – вода вязкости η . Число гидратации n . Найти траекторию его движения.

Замечания. Система координат, в которой решается задача, имеет следующий вид:

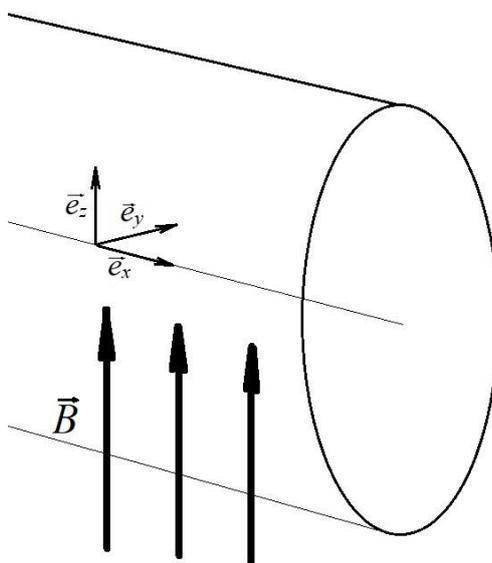


Рис. 1 Система координат

В дальнейшем для сокращения записи уравнений используются различные коэффициенты. Здесь приводятся их выражения через физические константы.

Таблица 1. Сокращенная запись коэффициентов

Коэффициент	Выражение
C_1	$6\pi r_{st}\eta/m$
C_2	qB/m
C_3	$6\pi r_{st}\eta v_{max}/m$
C_4	$6\pi r_{st}\eta v_{max}/(R^2 m)$
C_{CPT}	$2q^2/(3c^2)$
α_0	$-C_4$
α_1	$C_1^2/C_2 + C_2$

α_2	$-2C_1/C_2$
α_3	$1/C_2 - 2C_{CPT}C_1/(mC_2)$
α_4	$2 C_{CPT}/(m C_2)$
α_5	$C_{CPT}^2/(m^2 C_2)$

Система уравнений. В работе [5] получена система дифференциальных уравнений для случая без радиационного трения. Сила радиационного трения выражается следующим образом:

$$F_{CPT} = \frac{2q}{3c^3} \ddot{r} \quad (1)$$

С ее учетом система уравнений движения иона примет такой вид:

$$\begin{cases} \dot{x} = -\frac{C_1}{C_2} \dot{y} + \frac{1}{C_2} \ddot{y} + \frac{C_{CPT}}{mC_2} \ddot{y} & (2.1) \\ \ddot{x} = -C_1 \dot{x} + \frac{C_{CPT}}{m} \ddot{x} - C_4 y^2 + C_2 \dot{y} + C_3 & (2.2) \end{cases} \quad (2)$$

Подстановкой (2.1) в (2.2) возможно получить уравнение:

$$\alpha_5 y^{(v)} + \alpha_4 y^{(iv)} + \alpha_3 y^{(iii)} + \alpha_2 y^{(ii)} + \alpha_1 y^{(i)} + \alpha_0 y^2 + C_3 = 0 \quad (3)$$

Где римскими цифрами в скобках обозначены производные по времени.

Задача Коши для уравнения (3) примет вид:

$$y(0) = 0 \quad y^{(i)}(0) = 0 \quad y^{(ii)}(0) = -\frac{v_{max} Bq}{m} \quad y^{(iii)}(0) = 0 \quad y^{(iv)}(0) = 0 \quad (4)$$

Решение для (3) предлагается получить методом Рунге-Кутты. Этот метод разностный, поэтому следует избегать асимптотического поведения функции. Доказано [5], что число Рейнольдса будет всякий раз много меньше единицы, в связи с чем производные координат любых порядков разрывов не испытывают.

Начальные условия системы (2) включают в себя (4) и имеют вид:

$$\begin{aligned} x(0) = 0 \quad x^{(i)}(0) = v_{max} \quad x^{(ii)}(0) = 0 \quad x^{(iii)}(0) = 0 \\ y(0) = 0 \quad y^{(i)}(0) = 0 \quad y^{(ii)}(0) = -\frac{v_{max} Bq}{m} \quad y^{(iii)}(0) = 0 \quad y^{(iv)}(0) = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

Для уравнения траектории необходимо интегрировать уравнение (2.1) с учетом (5):

$$x = -\frac{C_1}{C_2} y + \frac{1}{C_2} y^{(i)} + \frac{C_{CPT}}{mC_2} y^{(ii)} - \frac{C_{CPT} v_{max} Bq}{mC_2} \quad (6)$$

Окончательно представим (3) в виде:

$$\begin{aligned} f(y^{(iv)}, y^{(iii)}, y^{(ii)}, y^{(i)}, y) = y^{(v)} \\ = \beta_4 y^{(iv)} + \beta_3 y^{(iii)} + \beta_2 y^{(ii)} + \beta_1 y^{(i)} + \beta_0 y^2 + \bar{C}_3 \end{aligned} \quad (7)$$

Численный метод. Известно [3], что метод Рунге-Кутты обобщается на системы уравнений. Такую систему можно получить из (3) путем переобозначения производных. В работе [2] представлена таблица коэффициентов для решения уравнений пятого порядка. С ее учетом составлена схема решения дифференциальных уравнений 5-го порядка.

Усреднение (*Mittelbildung*) составит:

$$\begin{aligned}
 k &= \frac{1}{42} (25k_1 + 10k_2 + 10k_3 - 3k_4) \\
 k' &= \frac{1}{6} (16k_1 + 8k_2 + 8k_3 - 2k_4) \\
 k'' &= \frac{1}{2} (9k_1 + 6k_2 + 6k_3 - k_4) \\
 k''' &= \frac{5}{6} (4k_1 + 4k_2 + 4k_3) \\
 k'''' &= \frac{5}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 - k_4) \\
 k_i &= f_i(y^{(iv)}, y^{(iii)}, y^{(ii)}, y^{(i)}, y), \quad i \in \overline{1,4}
 \end{aligned} \tag{8}$$

Численная модель. Для численного моделирования траекторий выбраны три следующих иона: Na^+ , K^+ , Cl^- . В соответствии с известными значениями [1, 6, 7], составлена таблица констант.

Таблица 2. Значения констант

№ п/п	Ион	Масса, 10^{-27} кг	r_{st} , нм	q , 10^{-19} Кл	η , мПа·с	R , м	v_{max} , м/с	c , м/с	B , Тл
1	Na^+	137.99	0.339	1.60217663 4 (точно)	0.82	$2 \cdot 10^{-2}$ (точно)	2 (точно)	2997924 58 (точно)	1 (точно)
2	K^+	124.71	0.266	1.60217663 4 (точно)					
3	Cl^-	89.171	0.228	- 1.60217663 4 (точно)					

Получен график для данных ионов.

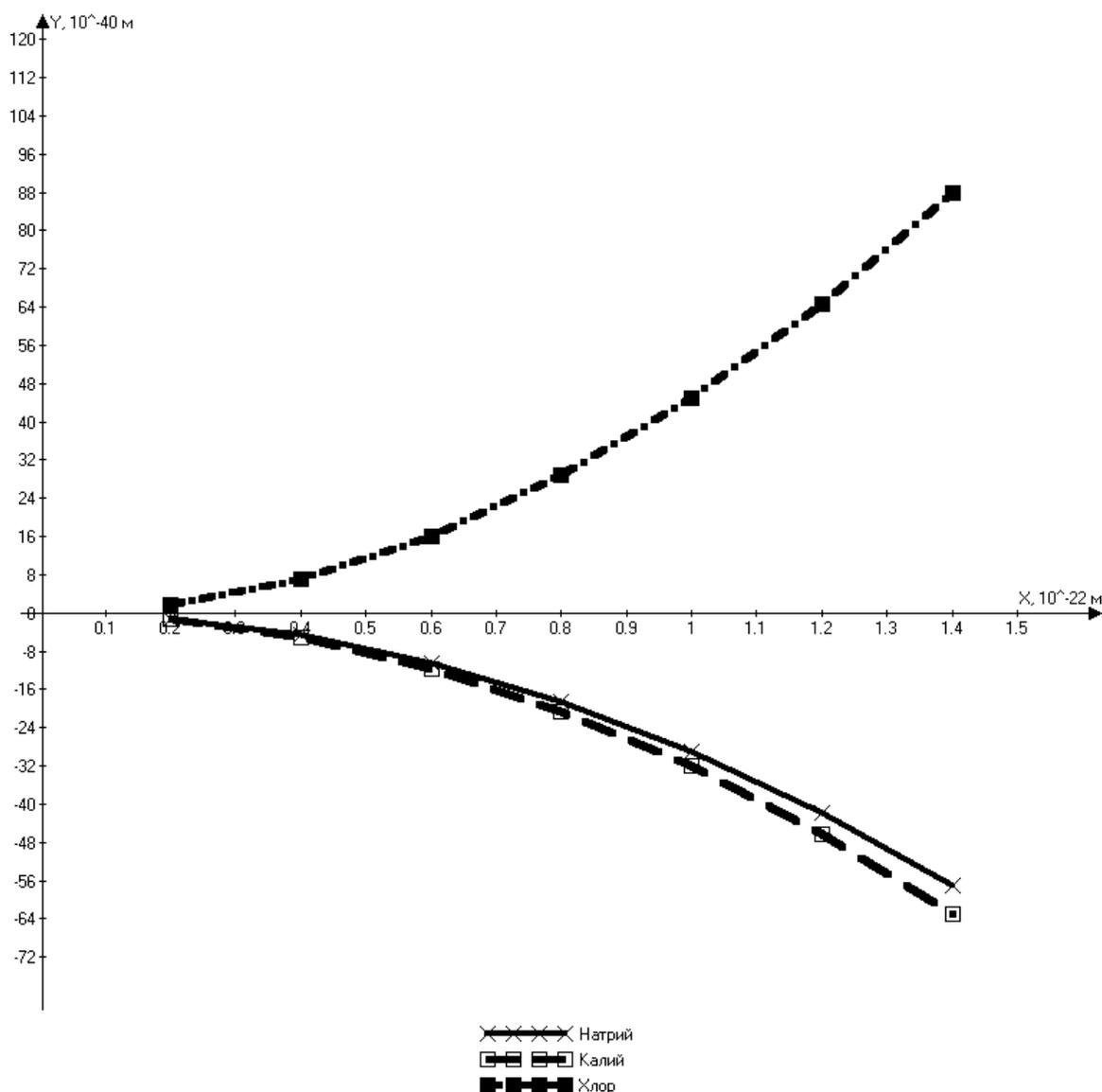


Рис. 2 График траектории ионов

Шаг составил 10^{-35} с. Выбраны 7 точек через 10^8 итераций.

Заключение. В работе изучались траектории ионов в круглых трубах с ламинарным течением в магнитном поле. Для решения уравнений движения разработана схема Рунге-Кутты для уравнений пятого порядка. Обобщены и представлены данные по ионам в воде. Для однозарядных ионов калия, натрия и хлора представлены графически участки траекторий.

Результаты исследования указывают на существование в природе видов движения, описание которых требует составления нелинейных дифференциальных уравнений пятого порядка. На основе метода Рунге-Кутты-Фельдберга, развитого Л. Коллатцем и Р. Цурмюлем в середине XX века, построено численное решение поставленной задачи. Кроме того, освежение ранее полученных математических результатов позволяет эффективно их

применять не только для решения дифференциальных уравнений пятого порядка, но и дифференциальных уравнений более высоких порядков.

Список литературы.

1. <https://www.physics.nist.gov/cuu/Constants/Table/allascii.txt>
2. Zurmül R. Runge-Kutta-Verfahren zur numerischen Integration von Differentialgleichungen n-ter Ordnung // ZAMM. 1948. Vol. 28. P. 173-182.
3. Коллатц Л. Численные методы решения дифференциальных уравнений. М.: Изд-во иностранной литературы, 1951. 459 с.
4. Клепиков Н.П. Силы торможения излучением и излучение заряженных частиц // УФН. 1985. Т. 146. № 2. С. 317-339.
5. 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.
6. Физические величины: Справочник / А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братовский и др.; Под. ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
7. Танганов Б.Б. Характеристики сольватированных наночастиц в спиртах (сольватные числа, массы и размеры) // Фундаментальные исследования. 2009. № 4. С. 29-33.