{מבוא}

בעבודה זו אנו חוקרים את התנועה האלקטרוקינטית של חלקיקים בתמיסת אלקטרוליט תחת השפעה של שדה חשמלי, ומפתחים תשתית נומרית לפתרון איטרטיבי של בעיות פיזיקליות לא-לינאריות מסוג זה.

באמצעות תהליכים אלקטרוקינטיים ניתן להניע ולבצע מניפולציות בחלקיקים זעירים בתחומים שונים, כגון:

ננו-טכנולוגיה, זרימה זעירה, הפרדה וניקוי, התפלת מים, אלקטרופורזה ועוד.

בשל כוחות אלקטרוסטטיים חזקים, נוצרת שכבת שפה דקה קרוב לפני החלקיק. עקב הפער בין סקלת החלקיק לבין סקלת שכבת השפה, נוצר קושי להגיע לפתרון נומרי של הבעיה המלאה.

אנו עושים שימוש בתנאי שפה אפקטיביים המתקבלים מאנליזה אסימפטוטית של שכבת השפה והתכונות הכימיות של החלקיק. תנאי שפה אלה פותחו על ידי פרופ' אהוד יריב ואורי שניצר עבור מחליפי יונים וחלקיקים אינרטיים בעלי מטען שפה, ובהם אנו משתמשים לצורך בניית פותר נומרי לפתרון הבעיה הלא-לינארית בסקלת החלקיק.

אנו מבצעים דיסקרטיזציה של המשוואות הדיפרנציאליות ושל תנאי השפה האפקטיביים, והתשתית הנומרית מאפשרת בנייה אוטומטית של פותר איטרטיבי בשיטת ניוטון. הפותר מאפשר קבלת תוצאות נומריות לתנועת חלקיקים מהסוג שלעיל, בהינתן עוצמת השדה החשמלי המופעל.

התוצאות עבור שדות חלשים אומתו על ידי השוואה לפתרונות אסימפטוטיים של הבעיה.

כמו כן, קיבלנו באמצעות הפותר הנומרי לראשונה פתרונות בשדות חזקים, אשר אין להם עדיין קירובים אסימפטוטיים. מפתרונות אלה ניתן ללמוד על אופי המערכת בשדות חזקים, כולל התנהגות אסימפטוטית של שכבת שפה הנוצרת בחזית החלקיק.

{הבעיה הפיזיקלית}

התאוריה האלקטרוקינטית מתארת את הדינמיקה של חלקיקים טעונים חשמלית בתוך תמיסת יונים.

כאשר חלקיק צובר מטען על פני שפתו, נוצרת שכבת יונים בעלת מטען נגדי בעקבות כוחות משיכה חשמליים וכך נוצרת מבנה של שכבה כפולה סביב לחלקיק.

שכבה זו, הנקראת ''שכבת דבאי'', ממסכת את מטען השפה של החלקיק ויוצרת עקב כך הפרש פוטנציאל

בין שפת החלקיק לבין הנוזל הניטרלי מחוץ לשכבה.

במקרה בו רוחב השכבה קטן באופן משמעותי מאשר ממדי החלקיק, ניתן לפתח פתרון אנליטי אסימפטוטי של הדינמיקה בשכבת השפה.

המשתנים בבעיית זרימה אלקטרוקינטית הם הפוטנציאל החשמלי, מהירות הנוזל והלחץ, וריכוז היונים. תנאי השפה מוגדרים בהתאם לתנאי הבעיה הספציפית ונקבעים על ידי צורת החלקיק, תכונותיו הכימיות והדינמיקה של הנוזל.

המשוואות הדיפרנציאליות החלקיות אשר מתארות את התנהגות המערכת תחת השפעתו של שדה חשמלי חיצוני הן מצומדות, לא-לינאריות, וללא פתרון אנליטי ידוע. כמו כן, על כל פותר נומרי יהיה להתמודד עם פער הסקלות שנוצר כתוצאה מכך שעובי שכבת השפה קטן משמעותית לעומת ממדי החלקיק.

על מנת להתמודד עם קושי זה, ניתן לפתח תנאי שפה אפקטיביים מחוץ לשכבת דבאי ולקבל מודל מקרוסקופי לבעיה על ידי שימוש בפתרון האסימפטוטי לשכבת השפה שלעיל. מודל זה ניתן לפתרון מקורב עבור חלקיק ספרי שנמצא תחת השפעה של שדה חשמלי חלש, אך קשה להרחיב פתרון אנליטי זה עבור מקרים כלליים יותר. יש לציין כי כאשר השדה החשמלי מתחזק, צפויות להתרחש תופעות לא-לינאריות משמעותיות, אשר עדיין לא נחקרו באופן משמעותי.

{שימושים}

לתופעות האלקטרוקינטיות שתוארו לעיל נמצאו שימושים רבים בפיתוח התקנים למיקרו-זרימה ושיטות לבקרה ומניפולציה של זרימת נולים בסקלות של מיקרונים וננומטרים. לצורך כך, נדרש מחקר ופיתוח של רכיבים מיקרו-זרימה שונים, כגון שסתומים, משאבות, גלאים, מיקסרים, מסננים, התקנים להפרדת חומרים וכדומה. רכיבים אלו מורכבים על מערכות זעירות הנראות "מעבדה-על-שבב", ומחוברים על ידי מיקרו-תעלות. מערכות אלו מיוצרות בשיטות של ננו-ליטוגרפיה. ניתן להשפיע על אופי הזרימה על ידי הפעלת שדה חשמלי חיצוני על פני המערכת כולה, או לחלופין, על ידי הפעלתו באופן לוקלי בתוך מיקרו-תעלה ספציפית.

לרוב, מספר ריינולדס בזרימה כזו הוא נמוך מאוד. על כן, האפקט הדומיננטי בזרימה זו הוא הצמיגות, ואיבר ההסעה של משוואות נבייר-סטוקס הופך להיות זניח, ולפיכך, מיקרו-זרימה היא לרוב זרימה למינארית.

בעשור האחרונה, התרחשה התקדמות משמעותית בחקר מיקרו-זרימה, הודות לתפוצתם של כלים ושיטות לייצור של מערכות קטנות, זולות וניידות עבור אבחון רפואי מהיר, ועבור מחקר בסיסי של תהליכים פיזיקליים, כימיים וביולוגיים. ניתן למנות שימושים לדוגמה וביניהם הפרדה של די.אנ.איי, אנליזה של תאים וזיהוי פלילי, מערכות מיקרו-כימיות מורכבות ומשולבות, הפרדה כרומטוגרפית מבוססת מצע צפוף (בלחץ גבוה), שיטות שונות להתפלת מים, העברה פיזיולוגית של תרופות אל רקמת המטרה, זיהוי גומרי מחלה ועוד.

{מטרת העבודה}

מטרת עבודה זו הינה לפתח ולממש תשתית תוכנה לצורך ייצור של פותרים נומריים איטרטיביים עבור בעיות אלקטרוקינטיות מקרוסקופיות לא-לינאריות, וליישם תשתית זו לתיאור ומחקר של מערכות אשר אין להן פתרונות אנליטיים ידועים. שתי מערכות בהן מתמקדת עבודה זו הן נדידת חלקיק מחליף יונים בשדה חשמלי ואלקטרופורזה של חלקיק אינרטי בעל מטען שפה. התשתית מורכבת מאוסף של מודולים המאפשרים לבנות מודל דיסקטי של בעיה אלקטרוקינטית ספציפית. בהינתן מודל זה, התשתית מאפשרת לפתור את מערכת המשוואות הלא-לינארית באופן אוטומטי. כך ניתן לחקור מערכות שונות מבחינה פיזיקלית ללא שינוי בקוד של הפותר הנומרי.

התשתית הנומרית והפתרונות הנומריים המתקבלים ממנה מאפשרים לקבל תובנות על התהליכים הכימיים והפיזיקליים במקרים הרבה יותר כלליים מאשר הידוע כיום. כמו כן, התוצאות של הפותר צפויות לאפשר פיתוח אנליטי של פתרונות אסימפטוטיים מקורבים, על סמך ההתנהגות האסימפטוטית של הפתרונות הנומריים. כמו כן, הפותר הנומרי יכול לשמש למחקר תאורטי של תופעות פיזיקליות מעניינות שנצפו באופן ניסיוני. תופעה אחת שניתן לציין כדוגמה היא הופעה של מיקרו-מערבולות בזרימה אלקטרוקינטית לא-לינארית, אשר יכולה לשמש כמיקסר עבור אפליקציות שונות של מיקרו-זרימה.

{השיטה הנומרית}

על מנת לבנות פותר נומרי לבעיה אלקטרוקינטית ספיציפית, יש לבצע תחילה דיסקרטיזציה של מערכת המשוואות הדיפרניאליות החלקיות ושל תנאי השפה על פני סריג סופי. אנו עושים שימוש בסריג רגולרי במערכת קואורדינטות ספרית, על מנת לנצל את הסימטריה הצירית בבעיה בתיאור תנאי השפה וחיסכון בזיכרון הנדרש לפותר, מכיוון שהבעיה הופכת להיות "דו-מימדית". מערכת המשוואות הדיסקרטית היא לא לינארית ולכן אנו עושים שימוש בפותר איטרטיבי מסוג ניוטון על מנת לקבל את הפתרון הדיסקרטי אחרי מספר קטן של איטרציות. על מנת לעשות שימוש בפותר זה, יש לנסח את מערכת המשוואות כאופרטור רב-ממדי, אשר עבורו אנו נדרשים למצוא את וקטור הקלט שיאפס את תוצאתו. בשיטת ניוטון, אנו נדרש לחשב את הגרדיינט של אופרטור זה על מנת לקרב אותו על ידי אופרטור לינארי וכך לחשב את השינוי הנדרש לווקטור הקלט, באמצעות פתרון של מערכת משוואות לינארית, המתקבלת מהגרדיינט ותוצאת האופרטור הנוכחיים.

מכיוון שחישוב אנליטי של הגרדיינט הוא מסובך למדי עבור הבעיות אותן אנו באים לפתור, בחרנו לממש את חישוב הגרדיינט על ידי שיטה של גזירה אוטומטית. בשיטה זו, האופרטור הלא-לינארי, אשר מייצג את מערכת המשוואות שיש לפתור, נוצר על ידי אלגברה של אופרטורים בסיסיים ופשוטים יותר, כגון אופרטור קבוע, וקטור הקלט, הפעלת טרנספורמציה לינארית, חישוב של פונקציה אנליטית, חיבור, חיסור, כפל איבר-איבר והרכבה של אופרטורים אחרים. כל אופרטור מממש את הממשק הבסיסי, המאפשר את חישוב וקטור התוצאה ואת מטריצת הגרדיינט שלו, בהינתן וקטור הקלט. החישוב מתאפשר על ידי הפעלה של כלל השרשרת בגזירה של אופרטורים מורכבים, כך שכל המידע שאופרטור נדרש על מנת לחשב את הגרדיינט שלו, מתקבל מהאופרטורים שמרכיבים אותו באופן היררכי. מכיוון שהגרדיינטים המתקבלים ניתנים לייצוג יעיל על ידי מטריצות דלילות, המשאבים הנדרשים לחישוב הגרדיינט בשיטה זו זניחים יחסית למשאבים הנדרשים לפתרון המערכת הלינארית הנדרשת לחישוב צעד ניוטון.

מבנה נתונים זה מאפשר לבצע אופטימיזציה על הייצוג האופרטורי של מערכת המשוואות. כמו כן, נציין כי שינויים במודל הפיזיקלי של המערכת אינם דורשים שינויים במימוש הנומרי של הפותר, אלא רק בשינוי של האופרטורים הרלוונטיים בייצוג הדיסקרטי של הבעיה.