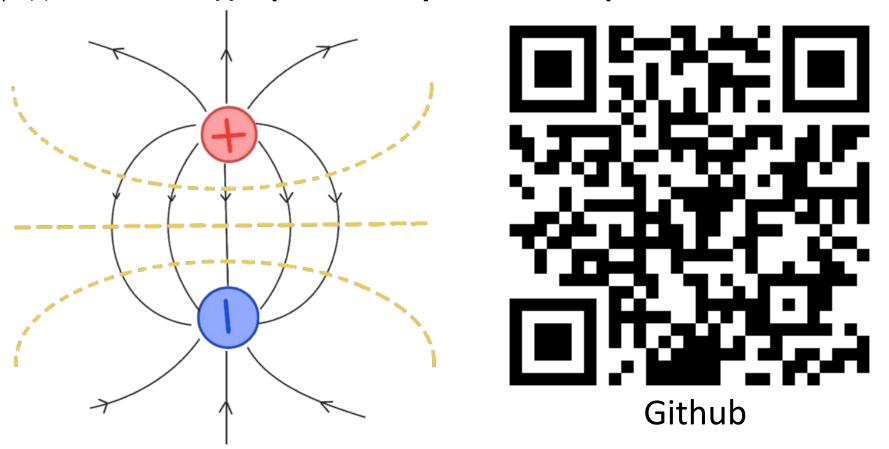
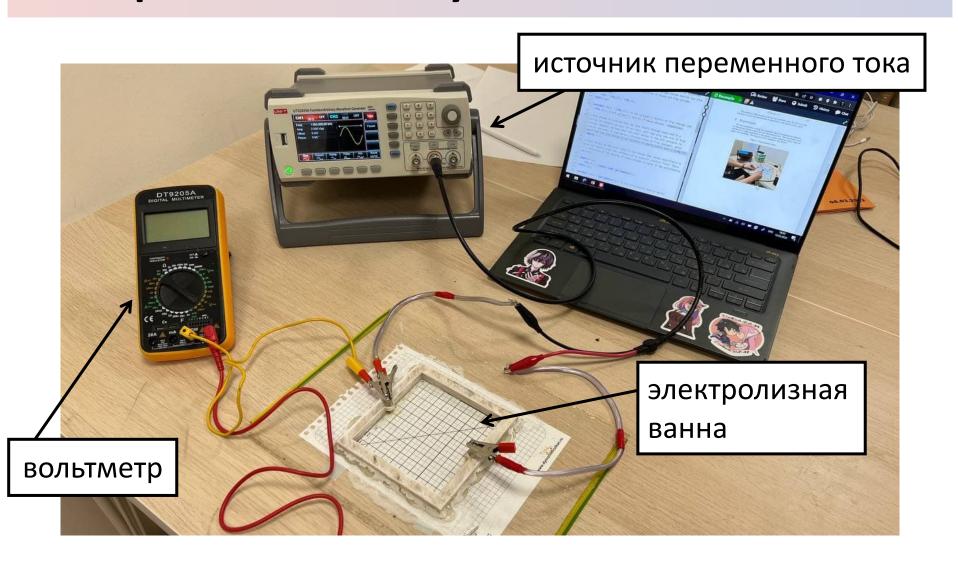
Компьютерные технологии решения научных задач

Распределение потенциалов в жидкостях

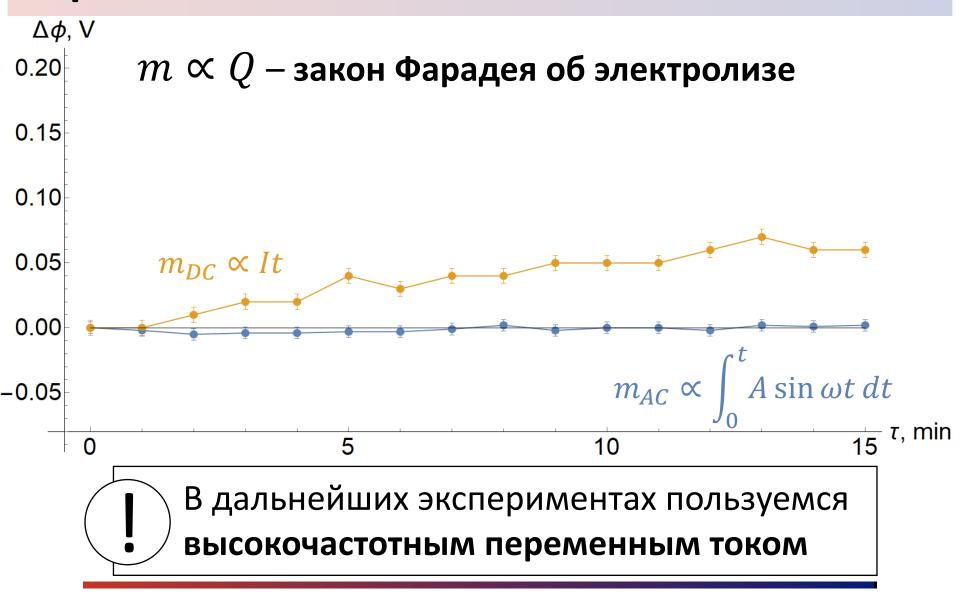
Поместите два электрода в емкость с водой и подайте на них безопасное напряжение. Определите распределение. Исследуйте, насколько найденные эквипотенциальные поверхности соответствуют предположениям для различных условий эксперимента.



Экспериментальная установка

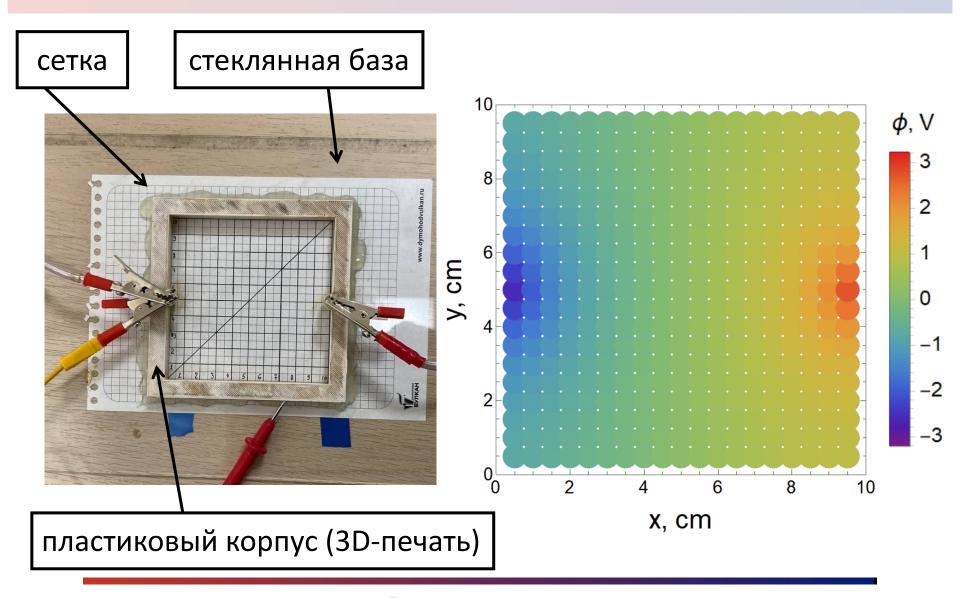


Переменный и постоянный ток



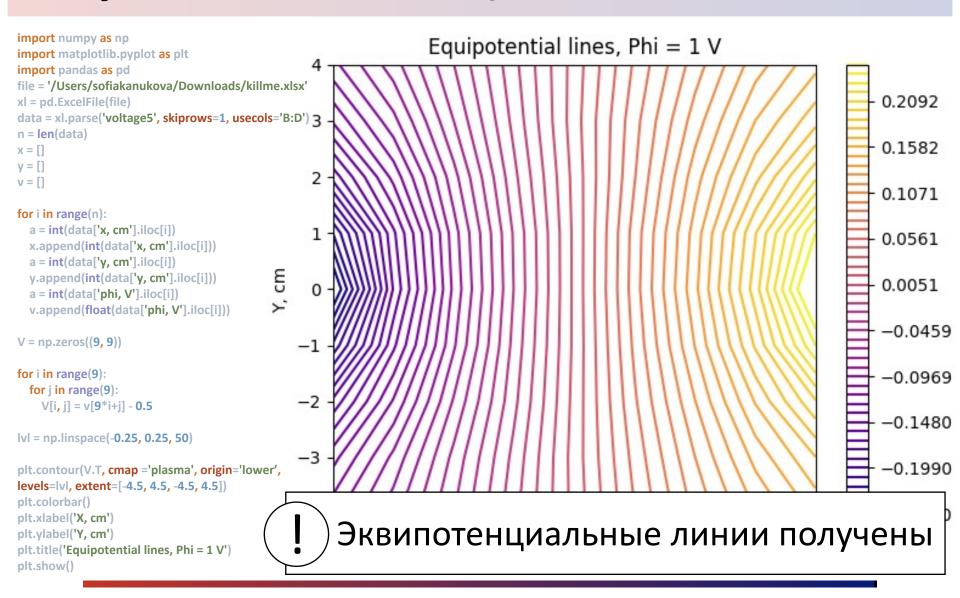
Введение

Дискретность потенциала



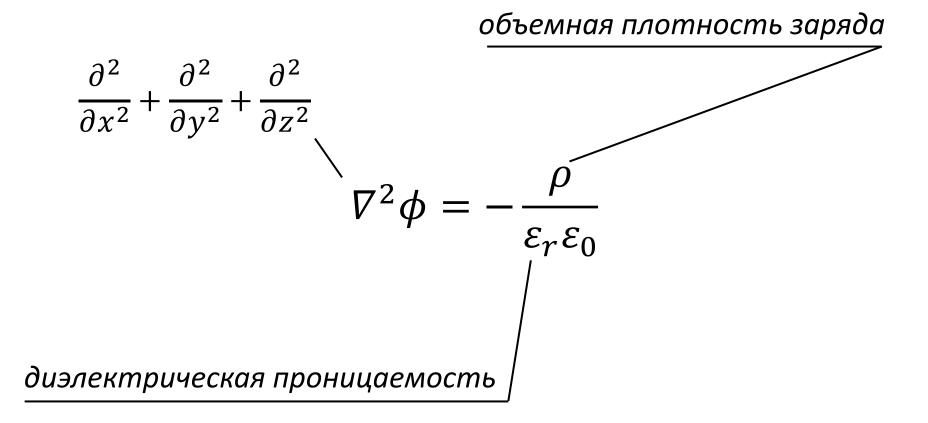
Введение

Получение эквипотенциальных линий



Теоретическая модель

Уравнение Пуассона



Теоретическая модель

Объемная плотность заряда

свободный & связанный заряд

$$\rho = V^{-1}(Q_f + Q_b)$$

Свободный заряд:

 $NaCl
ightharpoonup Na^+ + Cl^- (Q = const)$ свободный заряд сохраняется в процессе реакции

 $Q_f = 0$

Связанный заряд:

$$Q_b = -\frac{\chi}{1+\chi} Q_f$$

$$Q_b = 0$$



Объемная плотность заряда равна 0



Уравнение Лапласа

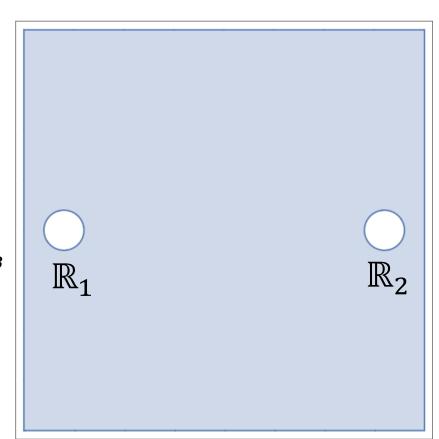
$$abla^2 \phi = -rac{
ho}{arepsilon_r arepsilon_0}
ightarrow
abla^2 \phi = 0$$

Можно решить численно

Граничные условия:

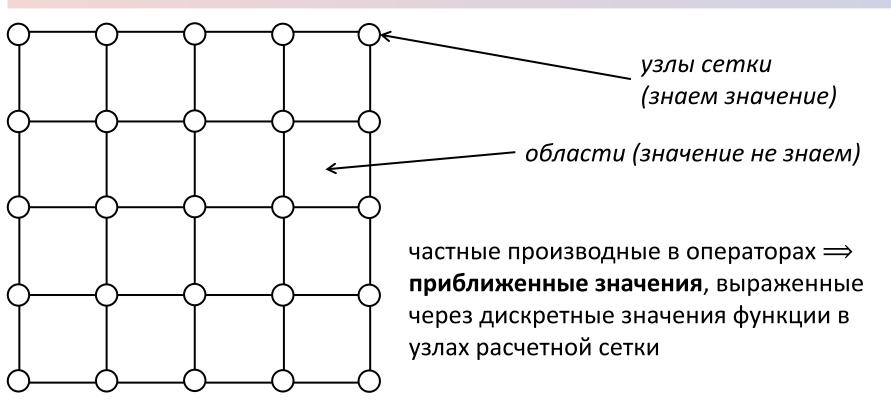
подаваемая разность потенциалов

$$\begin{cases} \phi(x, y, z) = -\frac{U}{2}, \{x, y, z\} \in \mathbb{R}_1 \\ \phi(x, y, z) = \frac{U}{2}, \{x, y, z\} \in \mathbb{R}_2 \end{cases}$$



Теоретическая модель

Метод конечных разностей



Формула конечных разностей для уравнения Лапласа:

$$V(i,j) = \frac{V(i-1,j) + V(i+1,j) + V(i,j-1) + V(i,j+1)}{4}$$

Алгоритм

- Задать границы области и число узлов сетки в каждом направлении;
- Определить шаг сетки в каждом направлении, создать ее;
- Задать начальные условия для функции в узлах сетки;
- Задать граничные условия на границе области и круговых электродах;
- На каждой итерации вычислить значения функции в узлах сетки, используя формулу конечных разностей;
- Повторять шаг 6 до тех пор, пока значения функции не сойдутся;

Используемые библиотеки

import numpy as np import matplotlib.pyplot as plt

Задание параметров

```
r = 0.5 #радиус круговых электродов
L = 3.5 #размер области
N = 100 #количество точек на оси x и у
h = L / (N-1) #шаг сетки
r1 = 0.1*L #расстояния до электродов
r2 = 0.9*L
phi = 40 #разность потенциалов
x = np.linspace(0, L, N)
y = np.linspace(0, L, N)
```

Создание сетки и начальных условий

Граничные условия

```
for i in range(N):
  for j in range(N):
     if i == 0 or i == N-1 or j == 0 or j == N-1:
       V[i,i] = 0.0
     elif np.sqrt((X[i, j]-r1)**2 + (Y[i, j]-L/2)**2) < r:
       V[i,i] = phi/2
     elif np.sqrt((X[i, j]-r2)**2 + (Y[i, j]-L/2)**2) < r:
       V[i, i] = -phi/2
V old = V.copy() #текущее решение
V new = V.copy() #новое решение
```

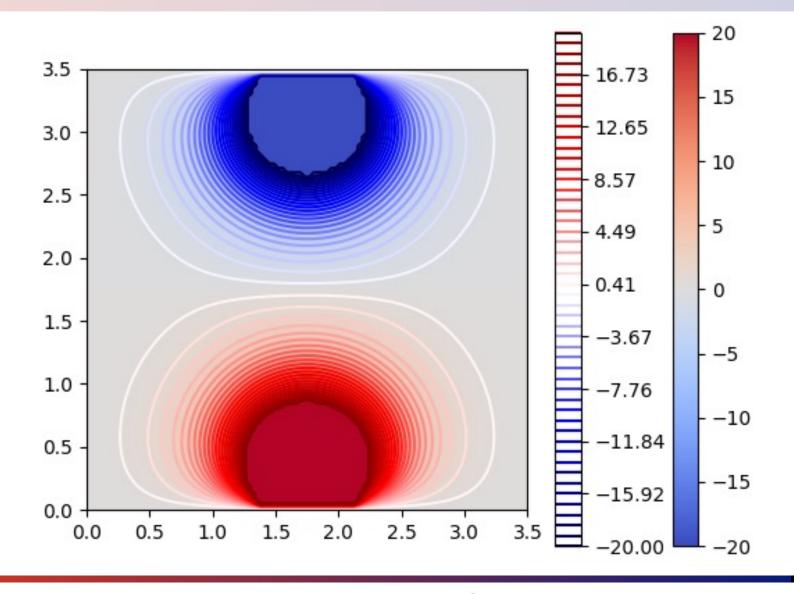
Реализация МКР

```
tol = 1e-2 #порог точности
delta = 1 #изменение решения на текущей итерации
while delta > tol:
           for i in range(1, N - 1):
                      for j in range(1, N - 1):
                                   if np.sqrt((X[i, j]-r1)**2 + (Y[i, j]-L/2)**2) >= r and np.sqrt(<math>(X[i, j]-r2)**2 + (Y[i, j]-r2)**2
L/2)**2) >= r:
                                            V_{new[i, j]} = 0.25 * (V_{old[i - 1, j]} + V_{old[i + 1, j]} + V_{old[i, j - 1]} + V_{old[i, j + 1]} + V_{old[i, j - 1]} + 
1])
            delta = np.max(np.abs(V_new - V_old)) #оценка изменения решения на итерации
           V_old = V_new.copy() #обновление текущего решения
```

Визуализация

```
|v| = np.linspace(-20, 20, 50) #задание контуров
plt.imshow(V new.T, cmap='coolwarm', origin='lower',
extent=[0, L, 0, L], aspect=1)
plt.colorbar()
plt.contour(V new.T,cmap ='seismic', origin='lower',
levels=|v|, extent=[0, L, 0, L])
plt.colorbar()
plt.figure(figsize=(cm to inch(20), cm to inch(20)))
plt.show()
```

Результат



Модель Python

η метрика

Показывает относительное расстояние между экспериментальными и теоретическими линиями

$$\eta = \frac{\sum_{i}^{n} w_{i} \cdot \Delta r_{i}}{l \cdot \sum_{j}^{n} w_{j}}$$

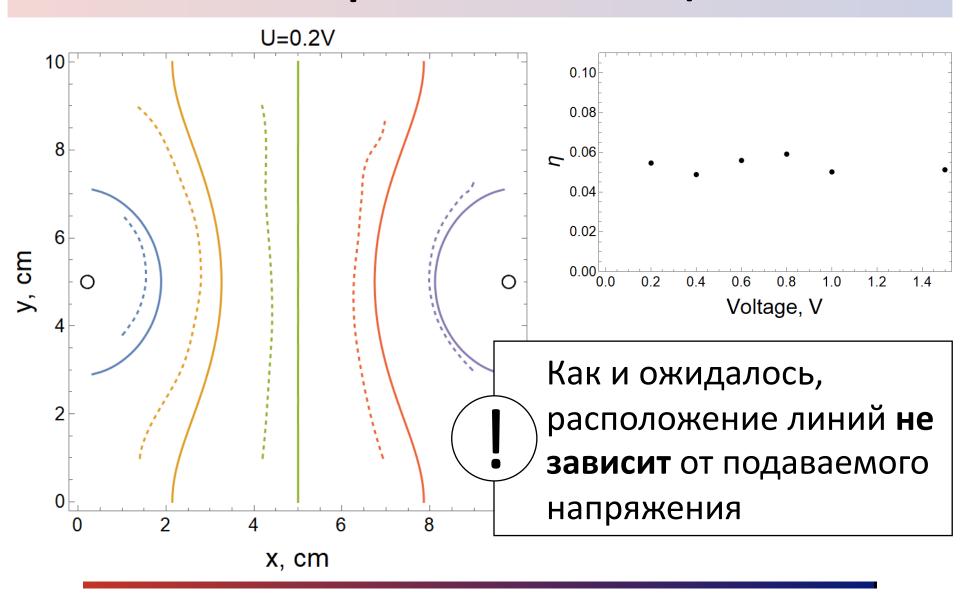
 w_i — длина і-й экспериментальной кривой

l – характерный размер электролизной ванны

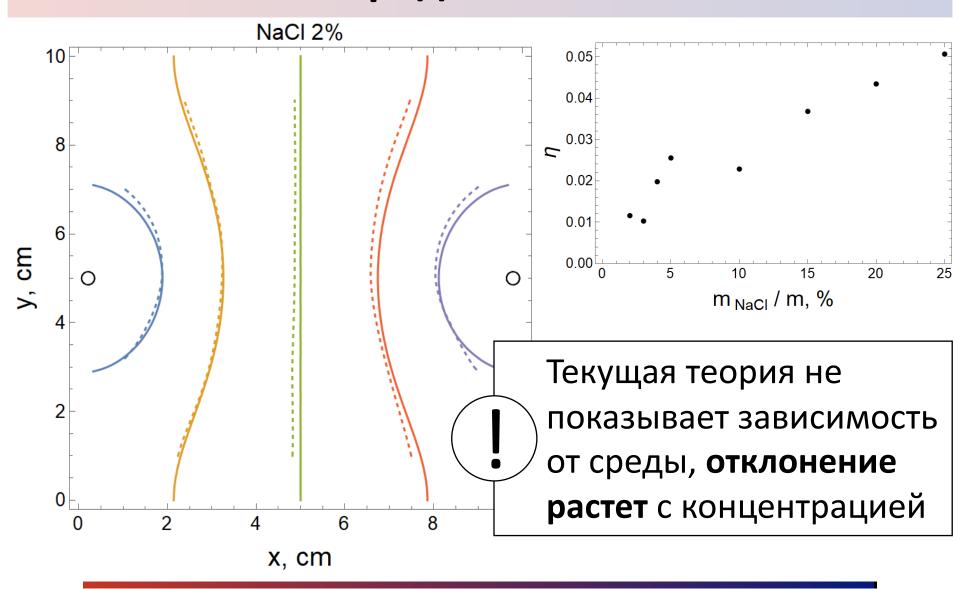


$$\Delta r_2 = \frac{r_1^2 + r_2^2 + \dots + r_m^2}{m}$$

Зависимость от разности потенциалов



Зависимость от среды



Продвинутая теория

Potential distribution

 $egin{array}{c} {\cal L}_{
m J}$ ина Дебая $abla^2 \phi = \lambda_d^{-2} \phi \end{array}$

 $\lambda_d^{-1} = \sqrt{rac{arepsilon_r arepsilon_0 kT}{2e^2 I}}$ ионная сила раствора

Осталось только суметь посчитать...

Coordinate

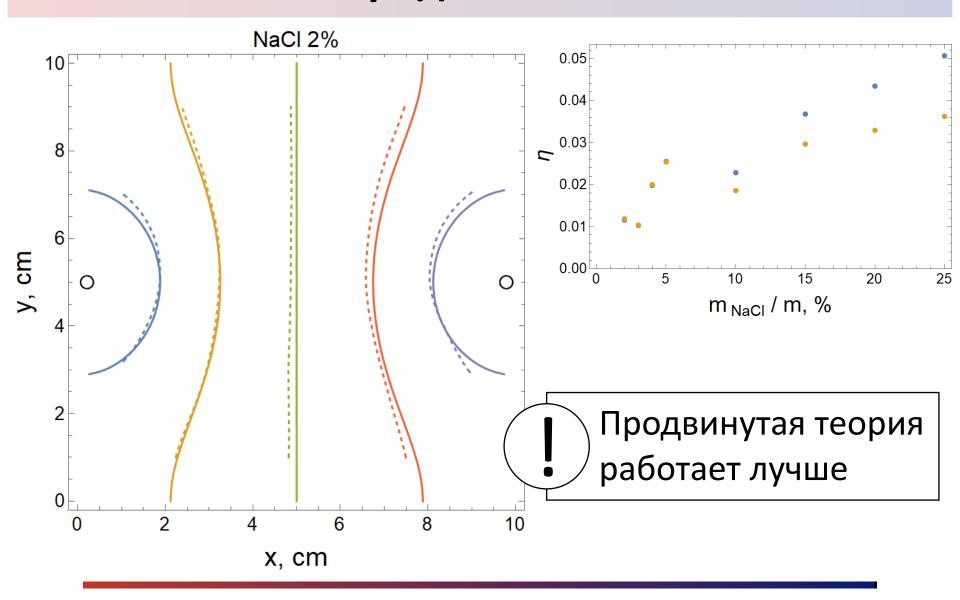
Нововведения в коде

```
or k in range(1000):

#Используем метод конечных разностей для нахождения лапласиана
laplacian = (np.roll(V_old, 1, axis=0) + np.roll(V_old, -1, axis=0) + np.roll(V_old, 1, axis=1)+
np.roll(V_old, -1, axis=1) - 2*V_old) / h**2 + (np.roll(V_old, 1, axis=0) + np.roll(V_old, -1,
axis=0) + np.roll(V_old, 1, axis=1) + np.roll(V_old, -1, axis=1)-2*V_old) / h**2

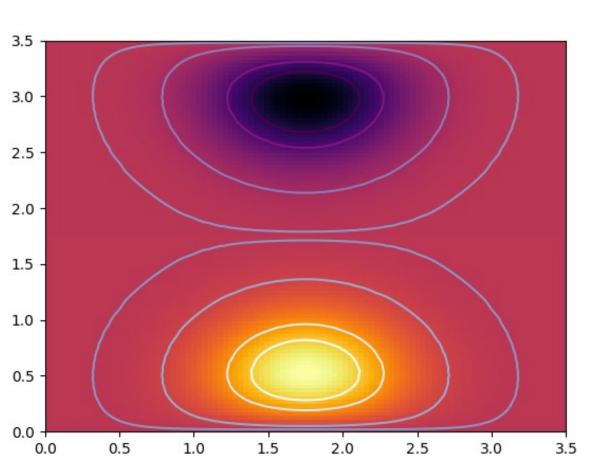
#Обновляем значение функции phi
V_old += 0.1 * (c*V_old - laplacian)
```

Зависимость от среды



Распределение потенциалов в жидкостях

Спасибо за внимание!





Github