

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИНФОРМАТИКА

---

DOI 10.15507/2079-6900.20.201804.460-472

УДК 517.956.2:51-72

### Моделирование взаимодействия разноразмерных объектов, помещенных в слабый электролит

© А. О. Сыромясов<sup>1</sup>

**Аннотация.** Решаются задачи о взаимодействии двух сферических частиц разных радиусов, а также сферической частицы и плоскости, помещенных в электролит. Толщина двойного электрического слоя предполагается большой, так что уравнение Пуассона–Больцмана, описывающее распределение электрического потенциала, линеаризуется. Поставленные задачи решаются методом мультипольного разложения; плоскость моделируется фиктивной частицей. Для коэффициентов разложения получены асимптотические представления. Вычислены силы взаимодействия между телами, находящимися в электролите. Рассмотрен предельный случай, в котором радиус одной сферы значительно превышает радиус другой. Показано, что он не сводится к описанию частицы и плоскости. Неожиданным результатом расчетов служит то, что при некоторых условиях плоскость может притягивать к себе сферу, имеющую потенциал того же знака, в то время как между двумя сферами с одноименными потенциалами на поверхностях всегда возникает отталкивание.

**Ключевые слова:** слабый электролит, линеаризованное уравнение Пуассона–Больцмана, двойной электрический слой, мультипольное разложение, асимптотические методы, фиктивная частица

### 1. Введение

Расчет электрического поля в жидком электролите, содержащем взвешенные частицы, – задача не новая, но по-прежнему актуальная. В последние десятилетия интерес к этой теме возрастает в связи с тем, что промышленность требует разработки новых материалов, а современные технологии позволяют наблюдать непосредственно за микрочастицами взвеси, измерять интенсивность их взаимодействия и даже манипулировать ими [1].

Хотя жидкость в целом нейтральна, вокруг помещенных в нее инородных тел образуются двойные электрические слои (ДЭС) с повышенной концентрацией ионов одного знака. Их перекрытие приводит к искажению электрического поля и взаимодействию тел. В зависимости от дальности и интенсивности взаимодействия результатом такого перекрытия может служить образование в электролите периодических структур [2–3].

Математической моделью электрического поля в электролите служит уравнение Пуассона–Больцмана [4], которое может быть линеаризовано в случае широких ДЭС [5].

<sup>1</sup>Сыромясов Алексей Олегович, доцент кафедры прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики, ФГБОУ ВО «МГУ им. Н. П. Огарёва» (430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевистская, д. 68/1), кандидат физико-математических наук, ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-6520-0204>, syal1@yandex.ru

В большинстве случаев предполагается, что инородные тела в жидкости являются сферами равного радиуса [6]. Однако следует рассматривать также взаимодействие разноразмерных частиц, поскольку несущая жидкость может содержать примеси нескольких сортов. Особый интерес представляет случай, когда размеры частиц отличаются во много раз.

Еще один класс задач, возникающий при изучении дисперсных систем и тесно связанный с предыдущим, – моделирование взаимодействия тела и бесконечной поверхности (например, плоскости или круглого цилиндра). Подобные проблемы появляются, в частности, при описании левитации частиц вблизи электрода [7] или фильтрации жидкости с примесями через фильтры, представляющие собой совокупность заряженных трубок [8].

Подходы, применяемые при математическом моделировании взаимодействий вида «частица + частица в электролите» и «частица + плоскость в электролите» (уже упомянутые работы [7–8], а также [9] и т. д.), обладают следующими общими чертами.

- Предположение о том, что ДЭС узки по сравнению с размерами взаимодействующих тел. Аналогично приближению теории смазки для вязкой жидкости, это позволяет перейти от трехмерной геометрии задачи к одномерной. С другой стороны, подобная гипотеза, справедливая для сильных электролитов, исключает из рассмотрения органические вещества. Кроме того, силы, возникающие между частицами взвеси, при выполнении такой гипотезы оказываются весьма короткодействующими.
- Использование специальных систем координат – бисфериической, бицилиндрической и т. д. Это позволяет разделить переменные в уравнении Пуассона–Больцмана. Однако указанные системы не могут быть эффективно применены в случаях, когда требуется описать взаимодействие большего числа тел.

Таким образом, целесообразно предложить иной метод расчета электрических полей, который бы позволял моделировать перекрытие широких ДЭС и учитывать наличие в жидкости многих тел одновременно. В настоящей статье такой метод применяется к моделированию взаимодействия двух сфер разных размеров, а также сферы и плоскости; жидкость, содержащая инородные тела, считается неподвижной.

## 2. Две сферы разных радиусов в слабом электролите

Рассмотрим частицы  $\Omega(1)$  и  $\Omega(2)$  радиусов  $a_1$  и  $a_2$ , соответственно; центры  $\Omega(1)$  и  $\Omega(2)$  соединяются вектором  $\vec{r}$  длины  $r$ . Введем прямоугольную систему координат  $Ox_1x_2x_3$  так, чтобы ее начало совпадало с центром первой сферы, а центр второй сферы лежал на оси  $Ox_3$ ; тогда  $\vec{r} = (0, 0, r)$ . Вектор  $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$  задает положение произвольной точки относительно начала координат (Рис. 2.1).

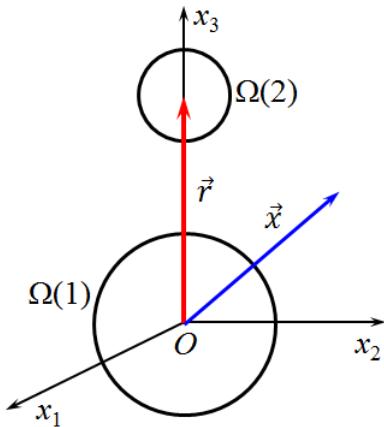


Рисунок 2.1

Геометрия задачи о двух сferах

Будем предполагать, что частицы являются твердыми и не перекрываются:

$$r \geq a_1 + a_2.$$

Потенциал поля  $\psi$  вне частиц удовлетворяет линеаризованному уравнению Пуассона–Больцмана:

$$\Delta\psi = \kappa^2\psi. \quad (2.1)$$

Здесь и далее  $\Delta$  – оператор Лапласа;  $\kappa^{-1}$  – характеристическая толщина ДЭС.

На поверхности каждой из частиц потенциал постоянен:

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_{a1}, \quad |\vec{x}| = a_1, \\ \psi &= \psi_{a2}, \quad |\vec{x} - \vec{r}| = a_2. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Наконец, на большом удалении от начала координат возмущения, вносимые инородными телами в распределение потенциала, пренебрежимо малы:

$$\psi \rightarrow 0, \quad |\vec{x}| \rightarrow \infty. \quad (2.3)$$

Для решения задачи (2.1)–(2.3) используется метод, описанный ранее в [10] применительно к двум идентичным сферическим частицам. Простейшим решением (2.1), имеющим сферическую симметрию и затухающим на бесконечности, служит

$$\Lambda_0(\vec{x}) = \frac{e^{-\kappa|\vec{x}|}}{|\vec{x}|}.$$

В силу линейности указанного уравнения любое его решение, удовлетворяющее (2.3), можно представить как линейную комбинацию мультиполей – частных производных  $\Lambda_0$ :

$$L_{j\dots k}(\vec{x}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \cdots \frac{\partial}{\partial x_k} \Lambda_0(\vec{x}). \quad (2.4)$$

Структура тензорных коэффициентов перед мультиполиями определяется с помощью теории нелинейных тензорных функций тензорного аргумента [11].

Для рассматриваемой конфигурации  $Ox_3$  служит осью симметрии, а плоскости  $Ox_1x_3$  и  $Ox_2x_3$  – зеркальными плоскостями, а значит, задача имеет группу симметрии  $3\cdot m$ . Из этого

после некоторых элементарных упрощений следует, что потенциал можно представить в виде:

$$\begin{aligned}\psi = & C_0(1)\Lambda_0(\vec{x}) + CB(1)\Lambda_3(\vec{x}) + CC(1)\Lambda_{33}(\vec{x}) + CD(1)\Lambda_{333}(\vec{x}) + \dots + \\ & + C_0(2)\Lambda_0(\vec{x} - \vec{r}) + CB(2)\Lambda_3(\vec{x} - \vec{r}) + CC(2)\Lambda_{33}(\vec{x} - \vec{r}) + CD(2)\Lambda_{333}(\vec{x} - \vec{r}) + \dots\end{aligned}\quad (2.5)$$

Номера 1 и 2 соответствуют мультиполям, зависящим от радиус-векторов  $\vec{x}$  и  $\vec{x} - \vec{r}$  относительно центров  $\Omega(1)$  и  $\Omega(2)$ .

Остающиеся неизвестными коэффициенты  $C_0(1), CB(1), \dots$  представляются в виде разложения по степеням двух малых параметров

$$\varepsilon = \frac{a_1}{r}, \quad \delta = \kappa r \quad (2.6)$$

и находятся подстановкой (2.4)–(2.5) в граничные условия (2.2).

Если  $\varepsilon$  и  $\delta$  имеют одинаковый порядок малости, то с точностью до суммарной четвертой степени параметров искомые коэффициенты имеют вид:

$$\begin{aligned}C_0(1) = & \Psi_1 \left\{ 1 - \varepsilon\beta + \varepsilon\delta\beta - \frac{1}{2}\varepsilon\delta^2\beta + \frac{1}{6}\varepsilon\delta^3\beta + \varepsilon^2\alpha - \varepsilon^2\delta(2\alpha + \beta) + \right. \\ & \left. + \varepsilon^2\delta^2(2\alpha + \beta) - \varepsilon^3\alpha\beta + \varepsilon^3\delta[\alpha^2 + \alpha(1 + 3\beta)] + \varepsilon^4(\alpha^2 + \alpha^3) \right\}, \\ CB(1) = & \Psi_1 a_1 \left( \varepsilon^2\beta - \frac{1}{2}\varepsilon^2\delta^2\beta - \varepsilon^3\alpha + \varepsilon^3\delta\alpha + \varepsilon^4\alpha\beta \right), \\ CC(1) = & \Psi_1 a_1^2 \left( -\frac{1}{2}\varepsilon^3\beta + \frac{1}{2}\varepsilon^4\alpha \right), \\ CD(1) = & -\frac{1}{6}\Psi_1 a_1^3 \varepsilon^4 \beta,\end{aligned}\quad (2.7)$$

где введены обозначения

$$\Psi_1 = a_1 \psi_{a1} e^{\kappa a_1}, \quad \Psi_2 = a_2 \psi_{a2} e^{\kappa a_2}, \quad \alpha = \frac{a_2}{a_1}, \quad \beta = \frac{\Psi_2}{\Psi_1}.$$

Чтобы найти  $C_0(2), CB(2), CC(2), CD(2)$ , следует в полученных формулах заменить  $\varepsilon$  на  $a_1/r$ , после чего поменять местами  $a_1$  и  $a_2$ ,  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  соответственно, а также поменять знаки у  $CB(2)$  и  $CD(2)$  на противоположные.

По известному распределению потенциала можно вычислить  $n_{fr;t}$  силу  $\vec{F}$ , действующую на каждую из частиц. Для произвольного тела  $\Omega$  с поверхностью  $\partial\Omega$  проекция этого вектора на ось  $Ox_i$  равна

$$F_i = \oint_{\partial\Omega} p_{ij} n_j dS, \quad (2.8)$$

где  $\vec{n}$  – единичный вектор внешней нормали к  $\partial\Omega$ ; по повторяющимся индексам производится суммирование;  $p_{ij}$  – компоненты тензора напряжений:

$$p_{ij} = -\frac{\varepsilon_F}{8\pi} \frac{\partial\psi}{\partial x_s} \frac{\partial\psi}{\partial x_s} \delta_{ij} + \frac{\varepsilon_F}{4\pi} \frac{\partial\psi}{\partial x_s} \frac{\partial\psi}{\partial x_s}. \quad (2.9)$$

Здесь  $\varepsilon_F = \text{const}$  – диэлектрическая проницаемость среды; выражение (2.9) записано в системе CGSE [12].

Подстановка (2.4)–(2.5), (2.7) в (2.8)–(2.9) дает для частицы  $\Omega(1)$  с центром в начале координат:

$$F_3 = \frac{\varepsilon_F \varepsilon^2 \Psi_1 \Psi_2}{a_1^2} \left[ -1 + \frac{1}{2}\delta^2 + \varepsilon \left( \beta + \frac{\alpha}{\beta} \right) - \varepsilon\delta \left( \beta + \frac{\alpha}{\beta} \right) - 3\varepsilon^2\alpha \right]. \quad (2.10)$$

Компоненты  $F_1$  и  $F_2$  равны нулю; это очевидно и из соображений симметрии.

При  $\varepsilon \rightarrow 0$ , что соответствует далеко расположенным и потому не взаимодействующим частицам, выражения (2.7) переходят в хорошо известное решение задачи о распределении потенциала вокруг одиночной сферы:

$$C_0(1) = \Psi_1, \quad C_0(2) = \Psi_2,$$

остальные множители равны нулю. При этом сила, действующая на сферу, также стремится к нулю.

Если оставить в (2.10) слагаемые наиболее низкого порядка малости,  $F_3$  примет вид

$$F_3 = -\frac{\varepsilon_F \varepsilon^2 \Psi_1 \Psi_2}{a_1^2}. \quad (2.11)$$

Пользуясь тем, что поверхностная плотность заряда на поверхности тела  $\Omega$  равна

$$-\frac{\varepsilon_F}{4\pi} \frac{\partial \psi}{\partial n},$$

в том же «главном» приближении получим, что сферы  $\Omega(1)$  и  $\Omega(2)$  имеют заряды

$$Q(1) = \varepsilon_F a_1 \psi_{a1}, \quad Q(2) = \varepsilon_F a_2 \psi_{a2}. \quad (2.12)$$

Сравнивая (2.11) и (2.12), легко прийти к выводу, что в пределе, когда сферы расположены далеко друг от друга, они взаимодействуют как точечные заряды  $Q(1)$  и  $Q(2)$ , расположенные на расстоянии  $r$  друг от друга. В частности, если  $\psi_{a1}$  и  $\psi_{a2}$  имеют одинаковые знаки, то сила, действующая между частицами, в своем «главном» приближении является силой отталкивания.

В случае, когда  $a_1 = a_2$ ,  $\psi_{a1} = \psi_{a2}$ , а значит, и  $\Psi_1 = \Psi_2$ , выражения (2.7) преобразуются в формулы, описывающие распределение потенциала вокруг двух одинаковых частиц [10], а выражение (2.10) – в соответствующую формулу для силы взаимодействия между двумя сферами.

### 3. Взаимодействие сферической частицы и плоскости

Пусть центр сферической частицы  $\Omega$ , имеющей радиус  $a$ , расположен на расстоянии  $h$  от плоскости  $S$ . Можно считать, что электролит, куда помещена частица взвеси, занимает полубесконечное пространство, ограниченное указанной плоскостью.

Для моделирования взаимодействия  $\Omega$  и  $S$  система координат  $Ox_1x_2x_3$  вводится так, что плоскость  $Ox_1x_2$  совпадает с  $S$ , а центр частицы имеет радиус-вектор  $\vec{h} = (0, 0, h)$ . Как и ранее, положение произвольной точки относительно начала координат задается вектором  $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$  (Рис. 3.1).

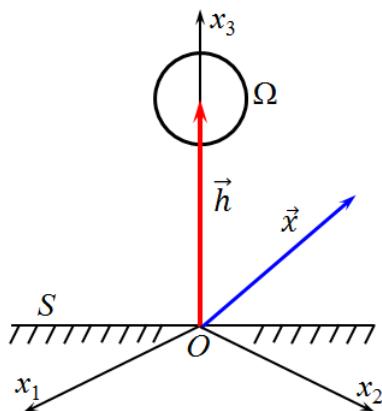


Рисунок 3.1

Геометрия задачи о сфере и плоскости

В дальнейшем размер частицы считается малым по сравнению с дистанцией от ее центра до плоскости; в свою очередь, это расстояние намного меньше характерной ширины ДЭС, поэтому

$$\varepsilon = \frac{a}{h}, \quad \delta = \kappa h$$

являются безразмерными малыми параметрами одного порядка.

Для потенциала  $\psi$  по-прежнему справедливо (2.1), но граничные условия, присоединяемые к этому уравнению, будут несколько иными, чем в предыдущем разделе.

Будем предполагать, что на поверхности сферы и на плоскости  $\psi$  принимает постоянные значения:

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_s, \quad x_3 = 0, \\ \psi &= \psi_a, \quad |\vec{x} - \vec{h}| = a. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Далеко от  $S$  и  $\Omega$  он стремится к нулю:

$$\psi \rightarrow 0, \quad x_3 \rightarrow \infty \vee |\vec{x} - \vec{h}| \rightarrow \infty. \tag{3.2}$$

Приближенное решение задачи (2.1), (3.1)–(3.2) изложено в [13–14]. Однако в этих работах сфера заменялась точечным зарядом, так что второе из условий (3.1) заведомо не выполнялось. Распределение потенциала отыскивалось в цилиндрических координатах и было записано в виде несобственного интеграла от выражения, содержащего функцию Бесселя  $J_0$ . Такая форма представления делает вычисление  $\psi$  неудобным:  $J_0$  имеет разные асимптотики при малых и больших значениях аргумента. Кроме того, из-за использования специфичной системы координат указанное решение нельзя распространить на случай нескольких частиц, находящихся в полубесконечной области.

Более общим подходом, теоретически позволяющим описать взаимодействие произвольного количества тел любой формы, является метод отражений. Традиционно он применяется при решении задач гидродинамики [15–16]. Его недостатком служит то, что граничные условия соответствующей задачи удовлетворяются лишь приближенно. В [17] предлагается более совершенный метод. Вместо взаимодействия каждой из частиц с плоскостью рассматривается взаимодействие реальной и фиктивной зеркально расположенной частицы, причем граничные условия на поверхности фиктивных частиц подбираются так, чтобы изначально заданные соотношения на плоскости выполнялись точно. Ниже мы в общих чертах будем следовать этому методу.

Представим искомый потенциал в виде

$$\psi = \psi_\infty + \psi', \quad (3.3)$$

где  $\psi_\infty$  – решение задачи об электролите, ограниченном лишь плоскостью  $S$ , без учета сферы  $\Omega$ , а  $\psi'$  – возмущение, вносимое  $\Omega$ . Тогда  $\psi_\infty$  удовлетворяет системе соотношений

$$\Delta\psi_\infty = \kappa^2\psi_\infty; \psi_\infty \Big|_{x_3=0} = \psi_s; \lim_{x_3 \rightarrow \infty} \psi_\infty = 0,$$

откуда

$$\psi_\infty = \psi_s e^{-\kappa x_3}. \quad (3.4)$$

Из (2.1), (3.1)–(3.3) следует, что для  $\psi'$  справедливы равенства

$$\begin{aligned} \Delta\psi' &= \kappa^2\psi', \\ \psi' &\rightarrow 0, |\vec{x} - \vec{h}| \rightarrow \infty, \\ \psi' &= 0, x_3 = 0, \\ \psi' + \psi_\infty &= \psi_a, |\vec{x} - \vec{h}| = a. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Вместо системы «сфера  $\Omega$  + плоскость  $S$ » будем изучать иную – «сфера  $\Omega$  + фиктивная сфера  $M$ ». Расположим частицу  $M$  зеркально симметрично  $\Omega$  относительно  $S$ , чтобы ее центр находился в точке с радиус-вектором  $-\vec{h}$  (Рис. 3.2).

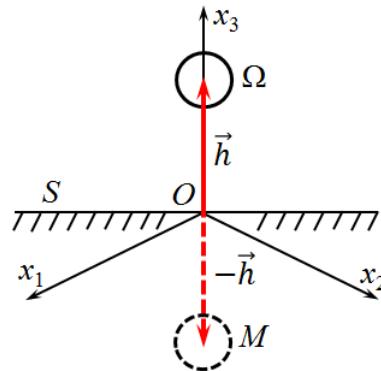


Рисунок 3.2

Положение зеркальной частицы

Аналогично (2.5), представим  $\psi'$  в виде суперпозиции возмущений, приходящих от двух сфер:

$$\begin{aligned} \psi' = & C_0(\Omega)\Lambda_0(\vec{x} - \vec{h}) + CB(\Omega)\Lambda_3(\vec{x} - \vec{h}) + CC(\Omega)\Lambda_{33}(\vec{x} - \vec{h}) + CD(\Omega)\Lambda_{333}(\vec{x} - \vec{h}) + \dots \\ & + C_0(M)\Lambda_0(\vec{x} + \vec{h}) + CB(M)\Lambda_3(\vec{x} + \vec{h}) + CC(M)\Lambda_{33}(\vec{x} + \vec{h}) + CD(M)\Lambda_{333}(\vec{x} + \vec{h}) + \dots \end{aligned}$$

Из определения (2.4) следует, что при  $x_3 = 0$  мультиполи четного порядка  $\Lambda_0(\vec{x} \pm \vec{h})$ ,  $\Lambda_{33}(\vec{x} \pm \vec{h}), \dots$  четны по  $\vec{h} = (0, 0, h)$ , а мультиполи  $\Lambda_3(\vec{x} \pm \vec{h})$ ,  $\Lambda_{333}(\vec{x} \pm \vec{h}), \dots$ , имеющие нечетный порядок, нечетны. Поэтому при

$$C_0(M) = -C_0(\Omega), CB(M) = CB(\Omega), CC(M) = -CC(\Omega), CD(M) = CD(\Omega), \dots$$

будут выполнены все условия задачи (3.5), кроме последнего. Итак,

$$\begin{aligned} \psi' = & C_0[\Lambda_0(\vec{x} - \vec{h}) - \Lambda_0(\vec{x} + \vec{h})] + CB[\Lambda_3(\vec{x} - \vec{h}) + \Lambda_3(\vec{x} + \vec{h})] + \\ & + CC[\Lambda_{33}(\vec{x} - \vec{h}) - \Lambda_{33}(\vec{x} + \vec{h})] + CD[\Lambda_{333}(\vec{x} - \vec{h}) + \Lambda_{333}(\vec{x} + \vec{h})] + \dots \end{aligned} \quad (3.6)$$

Скалярные коэффициенты  $C_0, CB, CC, CD, \dots$  находятся подстановкой (3.6) в граничное условие на поверхности  $\Omega$  и представляются разложением по степеням  $\varepsilon$  и  $\delta$ , упомянутым выше в данном разделе. Обозначив

$$\Psi_A = a\psi_a e^{\kappa a}, \quad \Psi_S = a\psi_s e^{\kappa a},$$

получим с точностью до четвертой степени малых параметров:

$$\begin{aligned} C_0 &= (\Psi_A - \Psi_S) \left( 1 + \frac{1}{2}\varepsilon + \frac{1}{4}\varepsilon^2 + \frac{1}{8}\varepsilon^3 + \frac{1}{8}\varepsilon^4 \right) + \Psi_S \left( \delta - \frac{1}{2}\delta^2 + \frac{1}{6}\delta^3 - \frac{1}{24}\delta^4 \right) + \\ &\quad + \left( -\Psi_A + \frac{3}{2}\Psi_S \right) \varepsilon\delta + \left( \Psi_A - \frac{9}{4}\Psi_S \right) \varepsilon\delta^2 + \left( -\frac{2}{3}\Psi_A + \frac{9}{4}\Psi_S \right) \varepsilon\delta^3 + \\ &\quad + \left( -\frac{1}{2}\Psi_A + \frac{3}{4}\Psi_S \right) \varepsilon^2\delta + \left( \Psi_A - \frac{43}{24}\Psi_S \right) \varepsilon^2\delta^2 + \left( -\frac{1}{4}\Psi_A + \frac{1}{8}\Psi_S \right) \varepsilon^3\delta, \\ CB &= a\varepsilon \left[ \Psi_S \left( -\delta + \delta^2 - \frac{1}{2}\delta^3 \right) + (\Psi_A - \Psi_S) \left( \frac{1}{4}\varepsilon + \frac{1}{8}\varepsilon^2 + \frac{1}{16}\varepsilon^3 \right) + \frac{1}{4}\Psi_S\varepsilon\delta + \right. \\ &\quad \left. + \left( -\frac{1}{2}\Psi_A + \frac{11}{8}\Psi_S \right) \varepsilon\delta^2 + \left( -\frac{1}{4}\Psi_A + \frac{3}{8}\Psi_S \right) \varepsilon^2\delta \right] \\ CC &= a^2\varepsilon^3 \left[ \Psi_S \left( -\frac{1}{6}\delta^2 + \frac{1}{16}\varepsilon\delta \right) + (\Psi_A - \Psi_S) \left( \frac{1}{16}\varepsilon + \frac{1}{32}\varepsilon^2 \right) \right], \\ CD &= \frac{1}{96}a^3\varepsilon^4(\Psi_A - \Psi_S). \end{aligned} \quad (3.7)$$

На Рис. 3.3 показаны эквипотенциальные линии  $\psi$  в плоскости  $Ox_1x_3$ , полученные после подстановки (3.4), (3.6)–(3.7) в (3.3). При расчетах параметрам были приданы следующие конкретные значения:  $a = 1$ ,  $\psi_a = \psi_s = 1$ ,  $\varepsilon = 1/4$ ,  $\delta = 1/3$ .

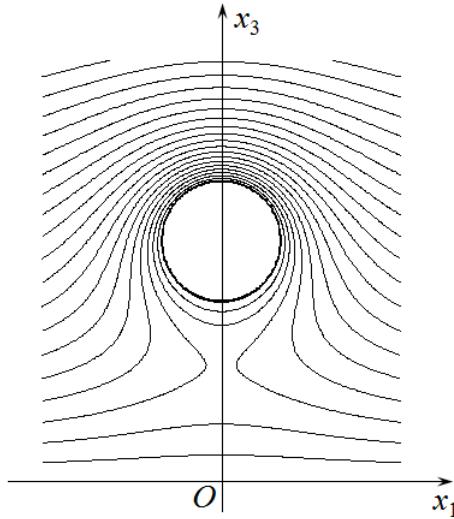


Рисунок 3.3

Распределение потенциала возле частицы и плоскости

Легко видеть, что при  $\Psi_A = 0$  решение (3.6)–(3.7) не принимает вид (3.4), а при  $\Psi_S = 0$  – не становится решением задачи об одиночной сфере вида

$$\psi = C_0\Lambda_0. \quad (3.8)$$

Это происходит потому, что поверхность  $|\vec{x} - \vec{h}| = a$  не является эквипотенциальной для  $\psi_\infty$ , а плоскость  $S$  – для функции (3.8).

При  $\varepsilon \rightarrow 0, \delta \rightarrow 0$  (3.6)–(3.7) переходят в (3.8), в котором  $C_0 = \Psi_A - \Psi_S$ . Таким образом, распределение  $\psi$  в начальном приближении пропорционально разности потенциалов на поверхности частицы  $\Omega$  и на плоскости.

Силу, действующую на сферу со стороны плоскости, можно вычислить, подставив (3.3)–(3.4), (3.6)–(3.7) в (2.8)–(2.9). Очевидно,  $F_1 = F_2 = 0$ ;  $F_3$  имеет второй порядок малости и с выбранной точностью принимает значение

$$\begin{aligned} F_3 = & \frac{\varepsilon_F}{a^2} \left[ \Psi_A^2 \left( -\frac{1}{4}\varepsilon^2 + \frac{1}{2}\varepsilon^2\delta^2 - \frac{1}{4}\varepsilon^3 + \frac{1}{2}\varepsilon^3\delta - \frac{3}{16}\varepsilon^4 \right) + \Psi_A \Psi_S \left( \varepsilon\delta - \varepsilon\delta^2 + \frac{1}{2}\varepsilon\delta^3 + \frac{1}{2}\varepsilon^2 - \right. \right. \\ & - \frac{13}{4}\varepsilon^2\delta^2 + \frac{1}{2}\varepsilon^3 - \frac{5}{4}\varepsilon^3\delta + \frac{3}{8}\varepsilon^4 \Big) + \Psi_S^2 \left( -\varepsilon\delta + 2\varepsilon\delta^2 - 2\varepsilon\delta^3 - \frac{1}{4}\varepsilon^2 + 3\varepsilon^2\delta^2 - \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{4}\varepsilon^3 + \frac{3}{4}\varepsilon^3\delta - \frac{3}{16}\varepsilon^4 \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.9)$$

В «главном» приближении эта сила равна

$$F_3 = \frac{\varepsilon_F}{a^2} \left[ -\frac{1}{4}\varepsilon^2 (\Psi_A - \Psi_S)^2 + \Psi_S(\Psi_A - \Psi_S)\varepsilon\delta \right],$$

что может вести к неожиданному результату: при определенном соотношении на  $\varepsilon$  и  $\delta$  между плоскостью и частицей, имеющими потенциалы одного и того же знака ( $\Psi_A \Psi_S \geq 0$ ), возникает *не отталкивание, а притяжение*. Это выражается в том, что  $F_3 < 0$ , а значит, вектор  $\vec{F}$  направлен в сторону плоскости, а не от нее.

В отсутствие разности потенциалов между  $\Omega$  и  $S$  их взаимодействие ожидаемо слабеет, поскольку при  $\Psi_A = \Psi_S$  величина (3.9) имеет уже третий порядок малости.

Наконец, при  $\Psi_S = 0$  выражение (3.9) переходит в

$$F_3 \approx -\frac{\varepsilon_F \varepsilon^2}{4a^2} \Psi_A^2 = -\frac{\varepsilon_F}{(2h)^2} \Psi_A^2;$$

это соответствует притяжению двух противоположных точечных зарядов, расположенных на том же расстоянии  $2h$  друг от друга, что и центры  $\Omega$  и  $M$ . Сами заряды вычисляются аналогично (2.12). Разница знаков у реального и фиктивного зарядов непосредственно вытекает из (3.6): за этот знак «отвечает» величина  $C_0$ , а множители перед  $\Lambda_0(\vec{x} - \vec{h})$  и  $\Lambda_0(\vec{x} + \vec{h})$  противоположны.

#### 4. Взаимодействие сфер с сильно различающимися радиусами

Рассмотрим случай, когда радиусы  $\Omega(1)$  и  $\Omega(2)$  отличаются во много раз, и выясним, сводится ли он к взаимодействию сферы и плоскости. Дополнительно предположим, что потенциалы на поверхностях сфер – величины одного порядка:  $\psi_{a2} \sim \psi_{a1}$ . Для определенности будем изучать действие  $\Omega(2)$  на  $\Omega(1)$ .

При  $a_2 \ll a_1$  (изучается действие маленькой сферы на большую) параметры (2.6) можно считать малыми, но произвольными. Отношения  $\alpha$  и  $\beta$  также малы, причем из-за близости  $\exp(\kappa a_1)$  и  $\exp(\kappa a_2)$  к 1 их можно считать величинами одного порядка. Зафиксировав  $\varepsilon, \delta, \Psi_1$  и устремляя  $\alpha$  и  $\beta$  к нулю в (2.7) и (2.10), получим

$$C_0(1) \rightarrow \Psi_1, CB(1) \rightarrow 0, CC(1) \rightarrow 0, CD(1) \rightarrow 0, F_3 \rightarrow 0,$$

т. е. большая частица «не чувствует» воздействий со стороны маленькой, а распределение  $\psi$  в целом совпадает с распределением вокруг одиночной сферы  $\Omega(1)$ .

При  $a_2 \gg a_1$  (большая сфера действует на маленькой) параметры  $\alpha$  и  $\beta$  много больше 1, и они по-прежнему одного порядка. При этом в силу неравенства  $a_1 + a_2 \leq r$  выполнены соотношения  $\varepsilon\alpha \leq 1$ ,  $\varepsilon\beta \leq 1$ . Поэтому нельзя считать, что  $\varepsilon$  меняется произвольно (в отличие от  $\delta$ ). Устремляя  $\alpha$  и  $\beta$  в формулах (2.7) и (2.10) к бесконечности, а  $\varepsilon$  и  $\delta$  – к нулю, учитывая ограничения на  $\varepsilon$ , найдем, что

$$C_0(1) \rightarrow \Psi_1(1 - \varepsilon\beta), \quad CB(1) \rightarrow 0, \quad CC(1) \rightarrow 0, \quad CD(1) \rightarrow 0, \quad F_3 \rightarrow \frac{\varepsilon_F \Psi_2^2}{a_2^2} \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^2 \varepsilon^2 (-\beta + \varepsilon\beta^2).$$

Асимптотика  $C_0(1)$  показывает, что большая сфера сильно искажает поле вблизи маленькой, только если их поверхности очень близки:  $\varepsilon\beta \rightarrow 1$ . Но даже при этом условии  $F_3 \rightarrow 0$ . Последний результат можно объяснить тем, что действующая на частицу сила обусловлена разными значениями потенциала в разных точках ее поверхности. В случае, когда радиус сферы  $\Omega(1)$  мал, главный вклад в распределение потенциала вносит возмущение, создаваемое  $\Omega(2)$ , а оно не успевает сильно измениться на расстоянии, равном диаметру маленькой частицы.

Наконец, изучим вопрос о возможности предельного перехода от задачи о двух сferах разного радиуса к задаче о сфере и плоскости. Пусть по-прежнему  $a_2 \gg a_1$ , а значит, роль «плоскости» будет играть поверхность сферы  $\Omega(2)$ . С формальной точки зрения далее требуется в формулах (2.6)–(2.7) заменить  $\varepsilon = a_1/r$  на выражение  $a_1/(h + a_2)$ , после чего устремить  $a_2$  к бесконечности.

Однако такой подход приводит к неустранимому противоречию. При рассмотрении двух сфер выполнялись неравенства  $r \geq a_1 + a_2$  и  $\delta = \kappa r \ll 1$ , откуда следовало, что и  $\kappa a_2 \ll 1$ . Однако ширина ДЭС  $\kappa^{-1}$  есть величина, фиксированная для заданного электролита, а потому при  $a_2 \rightarrow \infty$  неравенство  $\kappa a_2 \ll 1$  принципиально не может быть выполнено. Следовательно, и переход к задаче «частица + плоскость» невозможен.

## 5. Заключение

В настоящей работе задачи о распределении электрического потенциала в системах с разной геометрией решены одним и тем же методом мультипольного разложения; тем самым показана пригодность этого подхода к достаточно широкому кругу задач. На основе этого решения найдены силы, действующие на сферические частицы, помещенные в электролит. При этом получено, что сферические частицы, поверхности которых имеют потенциалы одного знака, всегда отталкиваются, а между сферой и плоскостью при определенных геометрических параметрах системы может возникать притяжение.

Изучено взаимодействие сфер, радиусы которых отличаются во много раз; выведено условие, при котором большая частица сильно искажает распределение потенциала вблизи меньшей. Показано, что взаимодействие двух сферических частиц в рамках рассматриваемого приближения не может быть сведено к взаимодействию сферы и плоскости: у этих систем разные геометрии, и бесконечное увеличение радиуса одной из сфер ведет к необходимости соответственного увеличения ширины ДЭС, что для фиксированного электролита невозможно.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. P. Habdas, E. R. Weeks, “Video microscopy of colloidal suspensions and colloidal crystals”, *Current Opinion in Colloid and Interface Science*, 7 (2002), 196–203.
- А. О. Сыромясов. Моделирование взаимодействия разноразмерных объектов, ...

2. И. Ф. Ефремов, *Периодические коллоидные структуры*, Химия, Л., 1971, 192 с.
3. M. F. Hsu, E. R. Dufresne, D. A. Weitz, “Charge stabilization in nonpolar solvents”, *Langmuir*, **21** (2005), 4881–4887.
4. Г. А. Остроумов, *Взаимодействие электрических и гидродинамических полей. Физические основы электрогидродинамики*, Наука, М., 1979, 320 с.
5. E. J. W. Verwey, J. Th. G. Overbeek, *Theory of the stability of lyophobic colloids*, Elsevier publishing company, Inc., New York-Amsterdam-London-Brussels, 1948, i-xii, 205 p.
6. J. Zhu, Min Li, R. Rogers [et al.], “Crystallization of hard-sphere colloids in microgravity”, *Nature*, **387** (1997), 883–885.
7. E. Yariv, “Electro-hydrodynamic particle levitation on electrodes”, *Journal of Fluid Mechanics*, **645** (2010), 187–210.
8. M. Wu, A. V. Kuznetsov, W. J. Jasper, “Modeling of particle trajectories in an electrostatically charged channel”, *Phys. Fluids*, **22**:4 (2010).
9. H. Liu, H. H. Bau, “The dielectrophoresis of cylindrical and spherical particles submerged in shells and in semi-infinite media”, *Phys. Fluids*, **16**:5 (2004), 1217–1228.
10. А. О. Сыромясов, Н. В. Еремкина, “Математическое моделирование электростатического взаимодействия двух одинаковых сфер, окруженных ДЭС”, *Журнал Средневолжского математического общества*, **17**:3 (2015), 100–108.
11. В. В. Лохин, Л. И. Седов, “Нелинейные тензорные функции от нескольких тензорных аргументов”, *Прикладная математика и механика*, **27**:3 (1963), 393–417.
12. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Гос. изд-во физ.-мат. лит-ры, М., 1959, 532 с.
13. F. H. Stillinger Jr., “Interfacial solutions of the Poisson-Boltzmann equation”, *J. Chem. Phys.*, **35**:5 (1961), 1584–1589.
14. R. Klein, H. H. von Grünberg, “Charge-stabilized colloidal suspensions. Phase behavior and effects of confinement”, *Pure and Applied Chemistry*, **73**:11 (2001), 1705–1719.
15. Дж. Хаппель, Г. Бреннер, *Гидродинамика при малых числах Рейнольдса*, Мир, М., 1976, 632 с.
16. В. Л. Сенницкий, “О силовом взаимодействии шара и вязкой жидкости в присутствии стенки”, *Прикладная механика и техническая физика*, **41**:1 (2000), 57–62.
17. В. Е. Баранов, С. И. Мартынов, “Моделирование динамики частиц в вязкой жидкости при наличии плоской стенки”, *Журнал вычислительной математики и математической физики*, **50**:9 (2010), 1669–1686.

Поступила 3.10.2018

MSC2010 35J25, 35Q70, 35B06, 35B40, 35C20

## Modeling of interaction of different-sized objects immersed in weak electrolyte

© A. O. Syromysov<sup>1</sup>

**Abstract.** Author solves problems about interaction of two spherical particles with different radii and also about interaction of a sphere and a plane that are immersed in electrolyte. Double electric layer near the objects' surfaces is supposed to be wide, so Poisson – Boltzmann equation describing the distribution of electric potential in the medium may be linearized. The problems stated are solved by multipole expansion method; the plane is modelled by a dummy particle. Asymptotic expressions are obtained for the coefficients of the expansion. Basing on this solution, forces acting between bodies in electrolyte are found. The particular case when the size of one sphere is much larger than the size of another particle is examined. Author shows that this case can't transform to interaction of a sphere and a plane. The unexpected result of calculation is that under certain conditions the plane may attract spherical particle which has potential of the same sign on its surface, while the interaction between two spheres having potentials of the same sign is always repulsion.

**Key Words:** weak electrolyte, linearized Poisson-Boltzmann equation, double electric layer, multipole expansion, asymptotic methods, dummy particle

## REFERENCES

1. P. Habdas, E. R. Weeks, “Video microscopy of colloidal suspensions and colloidal crystals”, *Current Opinion in Colloid and Interface Science*, **7** (2002), 196–203.
2. I. F. Efremov, *[Periodic colloidal structures]*, Khimiya Publ., Leningrad, 1971 (In Russ.), 192 p.
3. M. F. Hsu, E. R. Dufresne, D. A. Weitz, “Charge stabilization in nonpolar solvents”, *Langmuir*, **21** (2005), 4881–4887.
4. G. A. Ostroumov, *[Interaction of electrical and hydrodynamical fields. Physical foundations of electrohydrodynamics]*, Nauka Publ., Moscow, 1979 (In Russ.), 320 p.
5. E. J. W. Verwey, J. Th. G. Overbeek, *Theory of the stability of lyophobic colloids*, Elsevier publishing company, Inc., New York-Amsterdam-London-Brussels, 1948, i-xii, 205 p.
6. J. Zhu, Min Li, R. Rogers [et al.], “Crystallization of hard-sphere colloids in microgravity”, *Nature*, **387** (1997), 883–885.
7. E. Yariv, “Electro-hydrodynamic particle levitation on electrodes”, *Journal of Fluid Mechanics*, **645** (2010), 187–210.
8. M. Wu, A. V. Kuznetsov, W. J. Jasper, “Modeling of particle trajectories in an electrostatically charged channel”, *Phys. Fluids*, **22**:4 (2010).
9. H. Liu, H. H. Bau, “The dielectrophoresis of cylindrical and spherical particles submerged in shells and in semi-infinite media”, *Phys. Fluids*, **16**:5 (2004), 1217–1228.

<sup>1</sup>Aleksei O. Syromysov, Associate Professor, Department of Applied Mathematics, Differential Equations and Theoretical Mechanics, National Research Mordovia State University (68/1 Bolshevistskaya St., Saransk 430005, Russia), Ph.D. (Physics and Mathematics), ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-6520-0204>, syal1@yandex.ru

10. A. O. Syromyasov, N. V. Eremkina, “[Mathematical modelling of electrostatic interaction among two identical spheres surrounded by double electric layers]”, *Zhurnal Sredne-Volzhskogo matematicheskogo obshchestva*, **17**:3 (2015), 100–108. (In Russ.).
11. V. V. Lokhin, L. I. Sedov, “[Nonlinear tensor functions depending on several tensor arguments]”, *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, **27**:3 (1963), 393–417. (In Russ.).
12. L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*, Pergamon Press, 1960, 429 p.
13. F. H. Stillinger Jr., “Interfacial solutions of the Poisson-Boltzmann equation”, *J. Chem. Phys.*, **35**:5 (1961), 1584–1589.
14. R. Klein, H. H. von Grünberg, “Charge-stabilized colloidal suspensions. Phase behavior and effects of confinement”, *Pure and Applied Chemistry*, **73**:11 (2001), 1705–1719.
15. J. Happel, H. Brenner, *Low Reynolds number hydrodynamics*, Prentice-Hall, 1965, 553 p.
16. V. L. Sennitskii, “Force interaction of a sphere and a viscous fluid in the presence of a wall”, *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, **41**:1 (2000), 50–54.
17. V. E. Baranov, S. I. Martynov, “Simulation of particle dynamics in a viscous fluid near a plane wall”, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **50**:9 (2010), 1588 – 1604.

Submitted 3.10.2018