

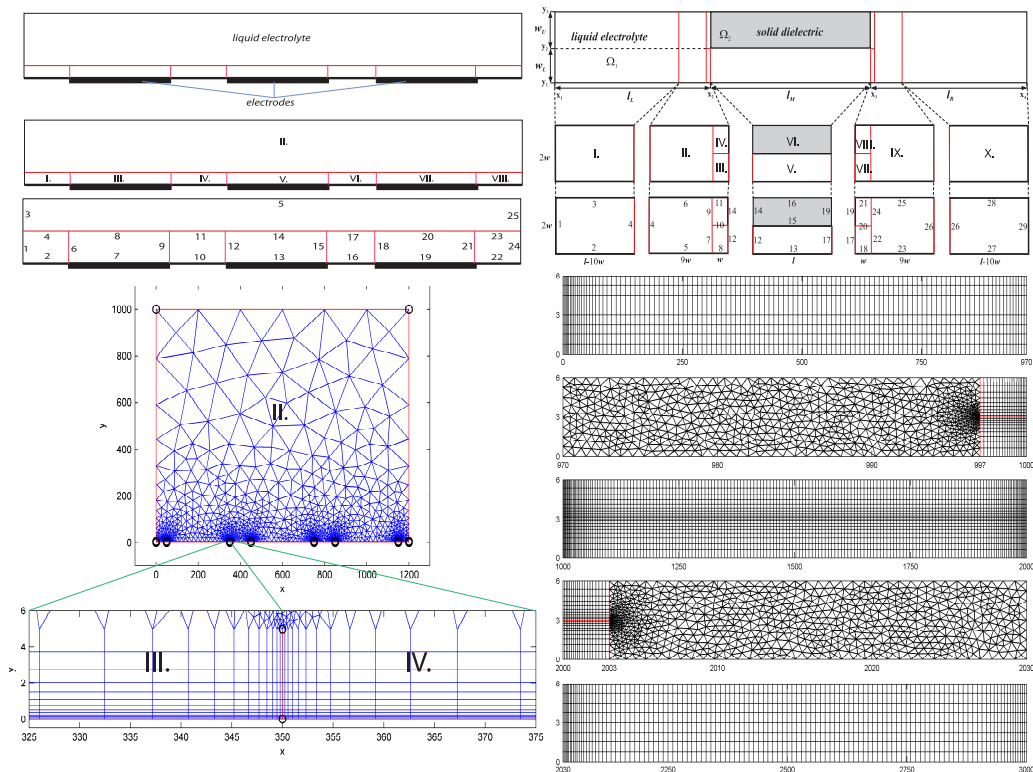
# Matematické modelování elektrochemických systémů s elektrickou dvojrstvou: Použití velmi nerovnoměrných prostorových sítí v programu COMSOL Multiphysics

*Jiří Hrdlička, Petr Červenka, Michal Příbyl, Dalimil Šnita*  
Ústav chemického inženýrství, VŠCHT Praha

V elektrochemických systémech s elektrickou dvojrstvou existují dvě charakteristické délky: délka systému  $L$  a tloušťka elektrické dvojrstvy  $\lambda_D$  (tzv. Debyeova délka). Prostorová diskretizační síť musí být patřičně zhuštěna v kritické zóně elektrické dvojrstvy a současně obsáhnout modelovou doménu. Velikost elementů sítě se pak mění i o několik řádů. Takto nevyvážené sítě s sebou přinášejí řadu komplikací. V první řadě jsou to nároky na operační paměť počítače, protože jsou sítě rozsáhlé, problém je řešen pro velké množství stupňů volnosti a operace s maticemi mohou přesáhnout dostupné hardwarové zdroje. Pochopitelně nárůst počtu stupňů volnosti prodlužuje dobu simulace. Dalším aspektem je validace výsledků. Pro řešení úloh s takto rozdílnými charakteristikami je často potřeba značně zhustit síť v kritických oblastech, což může kolidovat s předpokladem kontinua, počet částic při dané koncentraci může klesnout pod mez, kterou předpoklad diktuje. Komplexnost složitých multifyzikálních jevů stěžuje předpověditelnost vlivu parametrů sítě na běh řešení.

Budou prezentovány výsledky modelování elektrokinetického toku elektrolytu pod vlivem střídavého elektrického pole v mikrokanálu. Model je prostorově dvojrozměrný, sestává z lokálních bilancí složek, Laplaceovy-Poissonovy rovnice, Navierovy-Stokesovy rovnice a rovnice kontinuity. Modelový elektrolyt je symetrický.

Pro modelování byly využity defaultní trojúhelníkové, strukturované obdélníkové a kombinované sítě. Kombinovaná síť (viz. Obr. 1) má tu výhodu, že umožňuje pomyslné oddělení elektrické dvojrstvy a jádra elektrolytu, pro dvojrstvu byla použita obdélníková síť, zatímco na zbytek domény síť trojúhelníková. Tato strategie umožňuje detailní vyhodnocení z oblasti elektrické dvojrstvy, kde probíhají nejintenzivnější děje.



**Obrázek 1:** Ukázka kombinovaných prostorových sítí. Traveling-wave elektroosmóza (vlevo), DC elektroosmóza (vpravo).