中国空间科学技术

1995年12月

CHINESE SPACE SCIENCE AND TECHNOLOGY

第 6 其

对连续流式电泳简化数学模型的研究

禁止 胸袒莱 (中国科学院力学研究所,北京100080)

0646.1

广調要 用有限分析法对连续流式电泳的电流体力学过程进行了三维数值模拟。数值结果表明, Polezhaev^[1,2]等人提出的电泳简化数学模型在处理重力条件下有回流问题时,所得结果与三维准确方程的计算结果严重不符。因此该模型不能用于重力有回流问题。为了克服上述缺陷,在解析分析的基础上,文章提出了一个新的电泳问题简化数学模型。数值计算显示,该模型所得结果与三维准确方程的计算结果十分吻合。



主題词 电泳 连续流 数学模型 空间科学 研究 电三元体力学

1 引言

连续流式电泳是目前最有希望用于空间生物产业的一种分离提纯技术。空间飞行器所特有的微重力环境为生物制品的分离提纯开辟了新的前景。空间试验证明,在同样条件下,空间连续流式电泳的分离效率是地面的 730 倍。因此,美国、前苏联、西欧和日本等国都将其列入空间技术开发的重要方面,近年来投入大量人力物力对此进行研究^[3]。

电泳装置的设计和运行有赖于对电泳过程的电流体力学规律的认识。数值模拟是电泳研究中的一种重要手段。空间科学的数值研究,除了与地面科学一样要进行数值方法的研究以外,还有一个重要的特点,即解决最佳过程的优化问题。这是因为空间实验机会难得,因此每次实验必须在最佳状态下进行,而最佳参数的选择需要进行大量的数值计算。由于电泳过程的电流体力学方程十分复杂,直接进行三维数值模拟耗资巨大,经济上难以承担,因此,目前各国十分重视对简化的电流体力学数学模型的研究。

80 年代初,Saville^[4]对连续流式电泳充分发展试验段的速度场和温度场进行了研究,揭示出重力和微重力条件下电泳流场的差别,从而论证了空间连续流式电泳的可行性和优越性。由于 Saville 的工作中使用了速度场沿流动方向无变化这一近似假设,因此他的数学模

收稿日期,1995-04-26

本课题得到国家自然科学基金资助。

型仅能用于电泳试验段的流动,而不能用于进、出口区域的流动。为了克服上述缺陷,近年来 Bello 和 Polezhaev 提出一种简化二维模型[1,2,5]。Polezhaev 等人认为,电泳装置的厚度较薄,厚度方向的速度分量可近似为零,而温度和其余两个速度分量沿厚度方向的分布满足抛物形假设。根据这个假设,Polezhaev 等人将三维电流体力学方程转化成二维方程,从而使问题大为简化。而且这一模型既可用于电泳试验段,又能用于描述进、出口区域的流动。

我们在电泳研究中发现; Polezhaev 的假设与我们的理论分析不符。为了澄清上述问题,本文用有限分析方法对三维连续流式电泳进行了数值模拟, 计算结果表明, 在重力条件下, 当流场出现回流时, Polezhaev 的抛物形速度分布假设不能成立。本文分析了这一假设不能成立的原因。最后, 以三维数值计算结果和解析分析为依据, 提出一种新的电流体力学方程的二维简化数学模型, 并用此模型进行了计算。计算结果显示, 无论流场中是否存在回流, 这一模型均能使用, 所得结果与三维准确方程的数值结果十分吻合。

2 电泳问题的数学模型

连续流式电泳装置如图 1 所示,电泳室厚度为 $2d^*$ 、宽度为 $2h^*$,长度为 L^* 。通常情况下 $d^*/h^* \ll 1$, $d^*/L^* \ll 1$ 。含有不同组分的生物大分子颗粒悬浮液以平均速度 U_s^* 沿 y 方向流入装置,两侧电极产生一个沿 z 方向的电场,带电微粒在电场作用下沿 z 方向运动,由于不同生物大分子的电泳迁移率不同,它们经过电场后在出口处的浓度分布就会不同。因此可利用这一装置进行生物制品的分离。

为了简化数学描述,根据连续流式电泳特点, 作如下假设[1.8]:

- ① 混合物各组元的浓度及离子浓度远小于缓冲液浓度,对流体流动不产生影响;
- ② 磁效应和化学反应均不考虑,流体电中性 近似有效;
- ③ Boussinesq 近似成立,即除了与重力加速 度相关的项中流体密度视为可变外,其余各项流 体视为不可压,牛顿流体;
- ① 假定流体的物性参量(电导率 σ^* , 热传导系数 R^* , 粘度 μ^*) 不随温度而变化。

严格地讲,电泳问题需要将速度场、温度场和 生物大分子颗粒的浓度场三者联立进行求解,然

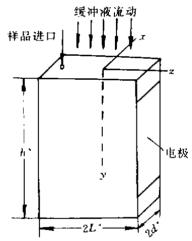


图 1 电泳示意图

而在上述假设下,问题可大为简化:首先、由于生物大分子的浓度场对流体流动的影响可忽略,因此,求解电泳问题可先求出速度场和温度场而后再求浓度场。本文的工作以及文献[1,2]中的工作均是重点研究温度场和速度场的求解问题,浓度分布问题在此不作研究。其次,在求解速度场和温度场时,根据电中性近似,电场力也可忽略,此时电场的作用,是以 Joule 热的形式表现出来。

1995年12月

在上述假设成立的条件下,可导出描述电泳室内速度场和温度场的方程组,该方程组也是目前连续流式电泳研究中的一个基本方程,其形式为^[2]:(文中凡带*右上标者为单位非"1"量纲,无*右上标者表示单位为"1"量纲)

$$\nabla \cdot \cdot V \cdot = 0 \tag{1}$$

$$\rho_{\omega}^{\star} \frac{\mathrm{d}V^{\star}}{\mathrm{d}t^{\star}} = - \nabla^{\star}P^{\star} + \rho_{\omega}^{\star} \mathbf{g}^{\star} + \mu^{\star} \nabla^{\star^{*}}V^{\star} + \rho_{\omega}^{\star} \mathbf{g}^{\star} \beta^{\star} (T_{\omega}^{\star} - T^{\star})$$
 (2)

$$\rho_w^* C_\rho^* \frac{\mathrm{d} T^*}{\mathrm{d} t^*} = k^* \nabla^{*2} T^* + \sigma^* E^{*2} \tag{3}$$

式中
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t^*} = \frac{\partial}{\partial t^*} + V^* \cdot \nabla^*,$$

$$\nabla^* = \frac{\partial}{\partial x^*} i + \frac{\partial}{\partial y^*} j + \frac{\partial}{\partial z^*} + k;$$

C; 为流体热容量;

V'为流体速度;

 P^* 为流体压力;

g*为重力加速度;

 T^* 为流体温度;

E 为电场强度;

k' 为热传导系数:

σ'为电导率;

μ*为流体粘度:

 T_* 为前后冷却壁壁面温度;

 $\rho_{u}^{*} = \rho^{*}(T_{u}^{*})$ 为壁面处流体密度;

 β *为流体热膨胀系数。

考虑定常流动,以 d^* , U^* , $\Delta T^* = \sigma^* E^{*^2} d^{*^2}/R^*$ 分别为厚度、速度和温度的特征量、对方程组进行量纲为 "1" 化,得

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \tag{4}$$

$$(\mathbf{V} \cdot \nabla)\mathbf{V} = - \nabla P + \frac{1}{R^{\rho}} \nabla^{\rho} \mathbf{V} - \frac{Gr}{R^{2\rho}} \theta \mathbf{j}$$
 (5)

$$(\mathbf{V} \cdot \nabla)\theta = \frac{1}{Pe} \nabla^2 \theta + \frac{1}{Pe} \tag{6}$$

式中 $x = x^*/d^*, y = y^*/d^*, z = z^*/d^*$

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}i + \frac{\partial}{\partial y}j + \frac{\partial}{\partial z}k$$

$$L=L^*/d^*$$
, $h=h^*/d^*$

$$m{V} = m{V}^*/U_0^*$$
 , $m{ heta} = (T^* - T_w^*)/\Delta T^*$

$$\nabla P = \frac{d^*}{\rho_*^* U_0^{*2}} \nabla^* P^* - \frac{g^* d^*}{U_0^{*2}} j$$

$$Re = U_0^* d^* / \nu^*$$
, $\nu^* = \mu^* / \rho_w^*$

$$Gr = g^*\beta^*\Delta T^*d^{*3}/\nu^*$$

$$Pe = \rho_w^* C_s^* U_0^* d^*/k^*$$

Grashof 数 Gr 表征了惯性效应相对粘性效应的重要性,Peclet 数 Pe 表征的是对流传热相对热传导的重要性。

鉴于本文重点在于检验数字模型,因而选用一个较为简单的电泳问题进行研究,来流为均匀来流,出口处流动充分发展,四壁存在冷却控温系统,其边界条件为

入口 y=0 处

$$V = j, \quad \theta = \text{const}$$
 (7)

出口 y = L 处

$$\frac{\partial V}{\partial y} = 0, \qquad \frac{\partial \theta}{\partial y} = 0$$
 (8)

前后壁存在控温系统,温度为常数,即在 $x = \pm 1$ 处

$$V = 0, \qquad \theta = 0 \tag{9}$$

側壁 z = h 处, 也有

$$V = 0, \qquad \theta = 0 \tag{10}$$

3 三维数值计算结果

本文用有限分析法对电泳的速度场和温度场进行了计算。有限分析法是陈景仁于 1979 年首先提出的,其基本思想是把求解域分为有限个小的子域 (网格元),将控制方程在网格之内线性化,然后在假定的边界条件下求出这组微分方程在基本网格元上的分析解。分析解把该网格元内中点上的参变量与网格元边界上各节点的参变量联系起来,以代数方程式列出。这样得到的有限分析解可以较好的保持原有问题物理特性,并具有自适应的迎风效

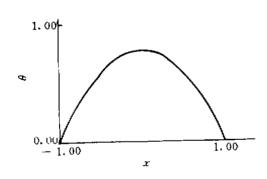


图 2 温度分布

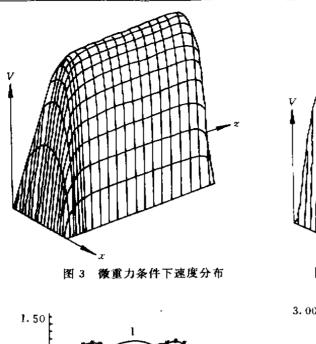
应。电泳过程中存在由热浮力引起的回流现象。 回流区的位置事先并不知道,采用有限分析法求 解这一问题,可以较好的模拟回流流动。用有限 分析法求解流体力学问题目前已十分成热,有关 文献已有详细叙述,在此不再重复^[6,7]。

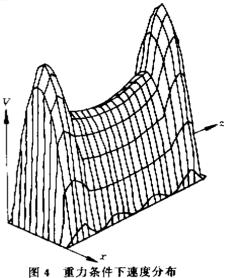
本文对不同来流速度和不同电场强度的多种情况进行了计算,由于本文重点研究数学模型问题,下面我们主要讨论沿 x 方向流动参量的分布情况。

数值计算结果表明,随流动参数的变化,温

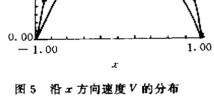
度分布的数值会相应发生变化,但温度分布的规律没有改变,沿x方向温度基本呈**地物**形分布,如图 2 所示。

在几何相似条件下,重力环境和微重力环境下的速度分布差别很大,图 3 为微重力环境下的速度分布。从图中可见,速度变化沿 z 方向比较平绥,且无回流区。图 4 给出了重力条件下的速度分布,此时浮力效应显著,回流区很大,图 5 给出了重力环境下沿 x 方向速度 V 的分布,显然此时抛物形速度分布假设已不能成立。图 6 给出了沿 z 方向速度 V 的分布。









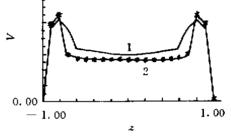


图 5 沿 x 方向速度 V 的分布 曲线 1—Polezhaev 模型结果 曲线 2—本文三维方程结果 * —本文简化方程结果

图 6 沿 z 方向速度 V 的分布 曲线 1—Polezhaev 模型结果 曲线 2—本文三维方程结果 * —本文简化方程结果

4 速度分布的解析分析

空间电泳研究的一个重要问题是电泳参数的优化问题。这需要进行大量的数值计算。用 前面的三维模型进行计算,将要花费大量的费用,因此,简化数学模型的研究是目前电泳 研究中的一个重要方向。

考虑到电泳室厚度远小于宽度与长度,即

$$d^*/L^* \ll 1, \qquad d^*/h^* \ll 1 \tag{11}$$

Polezhaev 等人提出垂直前后壁的速度分量近似为零,而其它两个速度分量和温度沿x方向呈现抛物形分布的假设,即

$$u(x,y,z) = 0 v(x,y,z) = v_0(y,z)(1-x^2) w(x,y,z) = w_0(y,z)(1-x^2) \theta(x,y,z) = \theta_0(y,z)(11-x^2)$$
(12)

Polezhaev 的假设实际上是将两平行板间流动的速度分布公式推广到电泳问题上,目前该假设尚无严格的数学证明[2]。用前述三维计算结果对其进行验证发现,工方向速度分量为零,温度和z方向速度分量满足抛物形分布规律这三个假设与三维结果吻合,y方向速度分量为抛物形分布的假设在微重力条件下也能成立,但在重力条件下与三维计算结果并不符。对此我们要作进一步分析。

我们仍然采用 Polezhaev 的第一个假设 u=0,将其代入 x 方向的动量方程中,得

$$\frac{\partial P}{\partial x} = 0 \tag{13}$$

由于电泳室厚度较薄,速度没 y 方向和 z 方向偏导数的量阶为 0 (U_0^*/h^*), 0 (U_0^*/d^*)。该量与速度沿 x 方向偏导数的量阶 0 (U_0^*/d^*) 相比为小量,因此可以认为,速度沿 y 和 z 方向的偏导数与 x 方向的偏导数相比可忽略。此处电泳问题中 Re 数很小,忽略对流 项。在上述前提下,另两个方向的动量方程可写成:

$$\frac{1}{Re}\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = \frac{Gr}{Re^2}\theta - \frac{gd^3}{\nu Re} + \frac{\partial P}{\partial y}$$
 (14)

$$\frac{1}{Re}\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = \frac{\partial P}{\partial y} \tag{15}$$

从式(15)不难导出 z 方向速度分布满足抛物形分布的结论。下面我们重点讨论 y 向速度分布。在式(14)中,第一项为浮力项,第二项为重力项,第三项为压力项。由式(13)可知压力项沿x 方向为一常数,并注意到 θ 分布为抛物形分布,即

$$\theta = \theta_0 (1 - x^2) \tag{16}$$

将上式代入式(14)中、积分式(14),并考虑到边界条件, $x=\pm 1$ 时,V=0,x=0时, $\frac{\partial V}{\partial x}=0$ 。最后可得:

$$V = A_1(1-x^2) - A_2\theta_0(1-x^2)^2$$
 (17)

式中
$$A_1 = Re(\frac{\partial P}{\partial y} - \frac{gd^3}{v^2})$$

$$A_2 = \frac{Gr}{Re}$$

根据这一公式可以看出,在徽重力条件下,热浮力项 Gr/Re 很小,上式第二项可以忽略,速度 V 的分布可以看作是抛物形分布。但在重力条件下,热浮力效应很强,上式第二项不能忽略,速度 V 的分布便不再具有抛物形分布的特点。从式(17)可以看出,随着 A_2 的增加,速度 V 在中间部分出现凹状,当 A_2 达到某一值以后,V 会出现反向流动。这一分析与我们三维计算结果完全吻合,同时也说明了 Polezhaev 提出的速度 V 分布假设在重力情况下不能成立。

5 连续流式电泳问题新的简化数学模型

根据前面的三维数值计算和解析分析,对电泳问题我们提出如下假设:

$$u = 0$$

$$v = v_0(x, y, z) \cdot (1 - x^2)$$

$$w = w_0(y, z) \cdot (1 - x^2)$$

$$\theta = \theta_0(y, z) \cdot (1 - x^2)$$
(18)

式中 $v_0(x,y,z) = A_1 - A_2\theta_0(y,z) \cdot (1-x^2)$

将上述公式代入基本方程(4)~(6)中,并令x=0,同时引进涡函数 $\Omega(y,z)$ 和流函数 $\phi(y,z)$,最后方程可简化成

$$\frac{\partial^{2} \psi}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2} \psi}{\partial z} = \Omega$$

$$v_{0} = -\frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad w_{0} = \frac{\partial \psi}{\partial y}$$

$$v_{0} \frac{\partial \Omega}{\partial y} + w_{0} \frac{\partial \Omega}{\partial z} = \frac{1}{Re} (\frac{\partial^{2} \Omega}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2} \Omega}{\partial z^{2}} - 2\Omega) - \frac{2Gr}{Re^{2}} \frac{\partial \theta_{0}}{\partial z}$$

$$v_{0} \frac{\partial \theta_{0}}{\partial y} + w_{0} \frac{\partial \theta_{0}}{\partial z} = \frac{1}{Pe} (\frac{\partial^{2} \theta_{0}}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2} \theta_{0}}{\partial z^{2}} + 1) - \frac{2\theta_{0}}{Pe}$$
(19)

至此,我们得到了一组新的电流体力学简化方程,用数值方法可求出 v_0 , w_0 和 θ_0 ,而后利用公式(18)便可得到三维速度场和温度场。关于具体的数值求解方法我们将在另文中介绍。下面就一些结果进行讨论。

我们分别用 Polezhaev 的简化模型^[2],本文提出的简化模型公式 (19) 和准确的三维数学模型公式 (4)~(6),对同一问题进行了数值计算,选用的流动参数为前述基本流动参数、图 5 和图 6 分别给出了沿 x 方向和沿 z 方向的速度 V 的分布情况,从图中可见,用本文提出的简化模型 (18) 所计算的结果基本上与三维数值结果吻合,而 Polezhaev 的模型则与三维准确方程的结果差别很大。图 7 为用三种不同模型计算的 V 值在出口处的等值线图,从图中可见,用 Polezhaev 模型所得结果与三维结果有本质的不同,而本文的简化模型给出的等值线分布与三维结果具有相同的分布规律。

上述计算结果表明,本文提出的电流体力学简化模型,可以克服 Polezhaev 模型中的缺陷。这一模型既可用于微重力情况,也可在重力条件下使用。有了加速度参数可变的、地面和空间统一形式的简化公式,我们便可利用地面试验的参数,预测空间微重力下的情况。这对于空间试验的准备和地面模拟,空间试验结果的分析解释都有重要的意义。

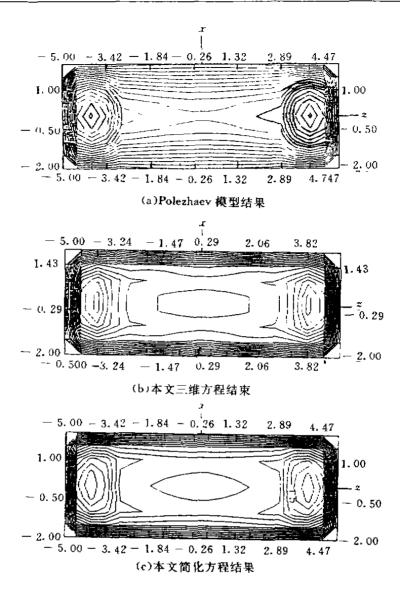


图 7 速度 V 的等值线图 (沿厚度方向几何尺寸放大 8 倍)

参 考 文 献

- 1 Bello M S, Polezhace V I. Microgravity Sci technol I, 1990 (1): 3~7
- 2 Bello M S, Polezhaev V I. Microgravity Sci technol 1, 1991 (4): 231~237
- 3 陶祖莱 · 关于豫重力电流体力学 · 力学进展, 1990, 20 (1): 69~82
- 4 Saville D A. Phys Chem Hydrodyn, 1980 (1), 297
- 5 Bello M S, Polezhaev V I. AIAA paper, 91-0112

(下转第19页)