

连续流式电泳浓度场的三维分析

李 松 温功碧 严宗毅

(北京大学力学系, 北京 100871)

陶 祖 莱

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

摘要 本文研究含不同微粒的缓冲液通过方形连续流式电泳室时在横向电场作用下的分离问题。首次全面考虑了三维的温度场、速度场和浓度场的相互作用。通过数值模拟揭示了微重力环境及通常重力条件下各参数的影响。文中还提出一种拟三维算法, 能使数值模拟的工作量大大减小而所得结果与三维算法的结果一致。

关键词 电泳, 微重力, 浓度场, 数值模拟

一、引 言

生物制品的分离和提纯是生物工程的一项关键技术, 目前尚未找到一种合乎理想的高效率的分离方法。空间飞行器所特有的微重力(10^{-3} — $10^{-4}g^*$)环境, 为生物制品的分离、提纯开辟了新的前景。因此, 美、苏、西欧和日本等国都将此列入空间技术开发的重要方面, 投入大量人力、物力进行研究^[1]。目前生物制品空间分离、提纯最有希望的是空间连续流式电泳技术。空间试验证明, 在同样条件下, 它的分离效率是地面 730 倍。同时, 地面和空间实验的结果也都表明: 真正具有产业规模的空间连续流式电泳仪的设计及运行参数的优化选择, 有赖于对电泳过程、电流体力学规律的认识。

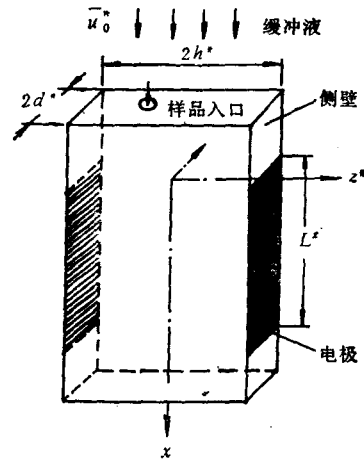


图 1 连续流式电泳装置示意图

从流体力学观点看, 连续流式电泳过程可简化为如图 1 所示的电流体力学问题。它是纵向 (x 方向) 低雷诺数 ($O(1)$ — $O(10)$) 流动、横向 (z 方向) 电泳迁移运动和电流热效应引起的对流运动三者的综合。因此是一个速度场、温度场和浓度场耦合的非线性问题。Saville^[2] 曾用摄动法研究了速度场和温度场的耦合效应, 揭示了微重力条件下和重

本文于 1991 年 7 月 23 日收到第一稿, 于 1991 年 11 月 1 日收到修改稿。

力条件下连续流式电泳流场的本质差别,从而论证了空间连续流式电泳的可行性和优越性.本文在严宗毅等人二维模型基础上建立了三维模型,对速度场、温度场和浓度场三者的相互作用进行了数值模拟,讨论了不同参数条件下不同物性微粒的分离效果以及不同数值方法的影响.

二、数学模型及解法

如图 1 所示,待分离样品和缓冲液以平均速度 \bar{u}_0^* 沿 x 方向流入电泳室.在两侧壁上有电极产生一个沿 z 方向的电场,带电微粒在电场作用下作横向运动,由于介质电阻,整个流槽会发热并形成温度场.当含带电微粒的缓冲液流过电泳装置时,由于不同微粒的特征尺寸和带电量不同,它们在出口处的浓度分布就不同,从而可在出口处不同位置收集到含不同微粒的纯度较高的悬浮液,达到分离的目的.

连续流式电泳涉及两个不同尺度的流动:由 x 方向外加压力梯度造成的大尺度流动(典型雷诺数为 $O(1) - O(10)$)和在外加电场下电动效应引起的小尺度流动($Re \sim O(10^{-2})$).这两种尺度流动的相互作用是连续流式电泳技术中电流体力学的一个基本问题.由于横向的电渗速度远小于纵向的大尺度流动速度,外加电场的存在对大尺度流动的影响主要体现为电流流过液体时的热效应引起温度场的变化,从而影响电导率、热传导系数和密度等物性参数,形成热对流引起流场改变,导致了温度场和速度场的耦合作用.

根据连续流式电泳的特点,可作如下假设:

(1) 纵向流动的人口区短,可认为流动沿 x 方向充分发展,即速度场沿 x 方向无变化.

(2) 流动的雷诺数较小,可忽略惯性力.

(3) 假定电场均匀.电场引起横向电渗流,但沿 z 方向的电渗速度远小于纵向流动的平均速度,因此可分别考虑两个方向的运动.

(4) 在本文研究的温度范围($0^\circ\text{C} - 35^\circ\text{C}$)内,可假定电导率、热传导系数、密度和粘度随温度成如下线性变化(带*的量表示有量纲量,不带*的量表示无量纲量)

$$\text{电导率 } \sigma^* = \sigma_0^*(1 + \sigma_1\theta)$$

$$\text{热传导系数 } K^* = K_0^*(1 + K_1\theta)$$

$$\text{密度 } \rho_0^* - \rho^* = \rho^*\beta^*(T^* - T_0^*), \quad \beta^* = -\frac{1}{\rho^*} \left(\frac{\partial \rho^*}{\partial T} \right)_{P^*}$$

其中无量纲温度 $\theta = \frac{T^* - T_w^*}{\Delta T^*}$, T_w^* 为壁面温度, $\Delta T^* = \frac{\sigma_0^* E_0^{*2} d^{*2}}{K_0^*}$ 是特征温度. σ_0^* , σ_1 , K_0^* , K_1 , T_0^* 的数值见下表.

(5) 因为悬浮液是较稀的,可不考虑电泳液中大分子之间的相互作用(包括表面的物理化学作用和相互的流体动力干扰).即可分别计算同一流场中不同大分子的浓度分布.

(6) 因为壁面对微粒的强干扰范围仅在几个微粒大小的数量级^[3,4],而微粒尺寸远小于电泳室尺寸,因而可不考虑壁面对分子的流体动力干扰.

(7) 不考虑复杂的电动力学过程,视带电微粒为理想介电质的球形带电颗粒,以球半径 a_0^* 表征微粒的特征尺寸,带电量 q_0^* 表征其电性质.

在计算中采用下表的一组量作为基本参数:

(1) 缓冲液和样品

温度	T_0^*	10	°C
密度	ρ_0^*	1.0	g/cm ³
粘度	μ_0^*	1.33×10^{-2}	g/cm·s
热传导系数	K_0^*	5.82×10^{-3}	watts/cm·°C
热传导系数随温度的变化	$K_0^* K_1$	$9.1 \times 10^{-2} K_0^*$	watts/cm·°C
电导率	σ_0^*	6.7×10^{-4}	1/ohm-cm
电导率随温度变化率	$\sigma_0^* \sigma_1$	$1.1 \sigma_0^*$	1/ohm-cm
膨胀系数	β^*	8.62×10^{-3}	1/°C
* 方向平均流速	\bar{u}_0^*	0.2	cm/s
微粒的等价球半径	a_0^*	50	Å
微粒的等价带电量	q_0	50	单位基本电荷

(2) 电泳装置

缝距	$2d^*$	0.5	cm
长度	l^*	10	cm
宽度	$2h^*$	5	cm
场强	E^*	50	V/cm
壁面温度	T_w^*	308.2	°K
侧壁传热系数	h_0^*	1.0	watts/°C
(3) 重力加速度	g^*	980	cm/s ²

下面分别求解温度场、速度场和浓度场。

(1) 温度场

包括对流、传导和热源项的热平衡方程为:

$$C_p^* \bar{u}^* \frac{\partial T^*}{\partial x^*} = \nabla \cdot (K^* \nabla T^*) + \sigma^* E^* \quad (2.1.1)$$

其中 C_p^* 为体积热容量。以 d^* , \bar{u}^* 和 ΔT^* 分别为长度, 速度和温度的特征量, 无量纲化(2.1.1), 并利用上述假设(4)得:

$$P_e \mu \frac{\partial \theta}{\partial x} = \nabla \cdot [(1 + K_1 \theta) \nabla \theta] + (1 + \sigma_1 \theta)$$

因 $P_e = \frac{C_p^* \bar{u}_0^* d^*}{K_0^*} \ll 1$, 可忽略对流项; 又 $K_1 \ll 1$, 可设

$$\theta = \theta^{(0)} + K_1 \theta^{(1)} + K_1^2 \theta^{(2)} + \dots$$

取摄动的零阶近似^[4]得

$$0 = \nabla^2 \theta^{(0)} + \sigma_1 \theta^{(0)} + 1 \quad (2.1.2)$$

边界条件为

$$\left. \begin{aligned} y = \pm 1 & \quad \theta^{(0)} = 0 \\ z = \pm H & \quad \frac{\partial \theta^{(0)}}{\partial z} = \mp B_i \theta^{(0)} \end{aligned} \right\} \quad (2.1.3)$$

其中

$$H = \frac{h^*}{d^*}, \quad B_i = \frac{h^* d^*}{K_0^*} \quad (2.1.4)$$

令 $\theta^{(0)}(y, z) = \varphi(y, z) + \phi(y)$, 并代入(2.1.2),(2.1.3)得

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2\phi}{dy^2} + \sigma_1\phi &= -1 \\ y = \pm 1 \quad \phi &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.1.5)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} + \sigma_1\varphi &= 0 \\ y = \pm 1 \quad \varphi &= 0 \\ z = \pm H \quad \frac{\partial\varphi}{\partial z} &= \mp(B_1\varphi + B_2\phi) \end{aligned} \right\} \quad (2.1.6)$$

(2.1.5)的解为

$$\phi(y) = \frac{1}{\sigma_1} \left(\frac{\cos(Ny)}{\cos N} - 1 \right) \quad (2.1.7)$$

其中 $N^2 = \sigma_1$. 利用(2.1.5)式的结果, 并注意到 φ 是关于 y 的偶函数, 可求得(2.1.6)式的解

$$\varphi(y, z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos(\alpha_n y) \text{ch}(\beta_n z) \quad (2.1.8)$$

其中

$$\alpha_n = \frac{2n+1}{2}, \quad \beta_n = \sqrt{\alpha_n^2 - N^2} \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

$$a_n = -\frac{2B_1}{\sigma_1} \frac{f_2}{f_1}, \quad f_1 = \beta_n \text{sh}(\beta_n H) + B_2 \text{ch}(\beta_n H), \quad f_2 = (-1)^n \frac{\sigma_1}{\alpha_n \beta_n^2}$$

由(2.1.5)、(2.1.6)的解即可得无量纲温度场 $\theta^{(0)}(y, z)$, 其中截面温度分布如图 2 所示.

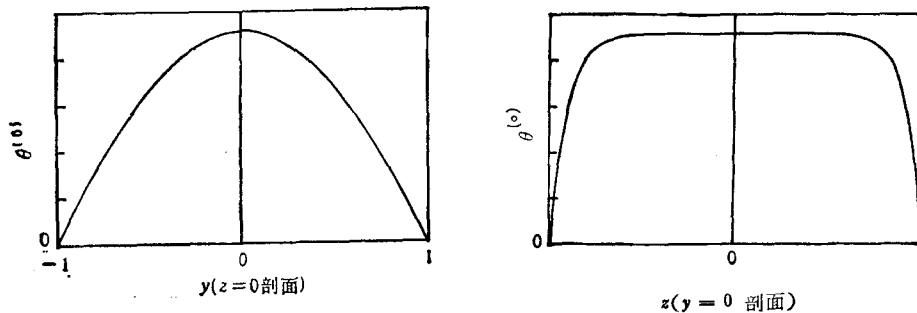


图 2 无量纲温度场的中截面曲线

(2) 速度场

考虑有自然对流的动力平衡方程, 忽略惯性力, 无量纲化并取摄动的零阶近似^[2]得:

$$0 = -K + N_2 - N_3\theta^{(0)} + \nabla^2 u^{(0)} \quad (2.2.1)$$

其中 K 为常数, 由总流量相等, 即

$$\int_{-H}^H \int_{-1}^1 u^{(0)}(y, z) dy dz = 1 \cdot 2H \cdot 2$$

确定.

$$N_2 = \frac{g^* d^{*3}}{\nu_0^{*2} Re}, \quad N_3 = \frac{g^* d^{*3} \beta^* \Delta T^*}{\nu_0^{*2} Re}$$

分别表示重力项与强迫对流项, 温度浮力效应与强迫对流项的相对重要性。其中

$$Re = \frac{u_0^* d^*}{\nu^*}, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

边界条件为:

$$y = \pm 1 \quad u^{(0)} = 0 \quad z = \pm H \quad u^{(0)} = 0 \quad (2.2.2)$$

设

$$u^{(0)} = \sum_{n=0}^{\infty} Z_n(x) \cos(\alpha_n y)$$

其中 $\cos(\alpha_n y)$ 为(2.2.1)式对应齐次方程的特征函数。代入(2.2.1) + (2.2.2)可解出

$$u^{(0)}(y, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \cos(\alpha_n y) \left[C_1 \operatorname{ch}(\alpha_n z) - \frac{N_3 a_n^*}{N^2} \operatorname{ch}(\beta_n z) - \frac{g_n^*}{\alpha_n^2} \right] \quad (2.2.3)$$

其中

$$C_1 = \left[\frac{N_3 a_n^*}{N^2} \operatorname{ch}(\beta_n H) + \frac{g_n^*}{\alpha_n^2} \right] / \operatorname{ch}(\alpha_n H)$$

$$g_n^* = \left(K - \frac{N_3}{\sigma_1} - N_2 \right) \frac{2(-1)^n}{\alpha_n} + \frac{N_3}{\sigma_1} \cdot \frac{2(-1)^n}{\alpha_n^2 - N^2} \alpha_n$$

基于这一解计算的 y - z 平面速度 $u^{(0)}$ 的分布下面将作详细讨论。

(3) 浓度场

由 Fick 定律, 某种微粒在缓冲液中的运动速度为

$$u^* = u^*(0) - \frac{D^*}{C^*} \frac{\partial C^*}{\partial x^*} \quad v^* = -\frac{D^*}{C^*} \frac{\partial C^*}{\partial y^*} \quad w^* = w_0 - \frac{D^*}{C^*} \frac{\partial C^*}{\partial z^*} \quad (2.3.1)$$

其中 $u^*(0), w_0^*$ 分别为没有浓度梯度时微粒沿 x, z 方向的运动速度。大分子在 z 方向的运动除了在壁面附近极小的强干扰范围外, 可视为匀速运动, 即粘性阻力、热力学力和电场力相平衡:

$$6\pi\mu^* a_0^* w_0^* = -\frac{1}{N_A} \frac{R^* T^*}{C^*} \frac{\partial C^*}{\partial z^*} + q_0^* E_0^* \quad (2.3.2)$$

其中 N_A 为阿佛伽德罗常数。将(2.3.2)与(2.3.1)第三式相比较, 可得

$$D^* = \frac{R^* T^*}{6\pi\mu^* a_0^* N_A} = \frac{R^*}{6\pi\mu^* a_0^* N_A} (T_w^* + \Delta T^* \cdot \theta) \quad (2.3.3)$$

$$w_0 = \frac{q_0^* E_0^*}{6\pi\mu^* a_0^*} \quad (2.3.4)$$

由连续方程

$$\nabla \cdot (C^* \mathbf{V}^*) = 0 \quad (2.3.5)$$

其中 $\mathbf{V}^* = u^* \mathbf{i} + v^* \mathbf{j} + w^* \mathbf{k}$ 将(3.3.1)代入(3.3.5), 以 x 方向平均流速 \bar{u}_0^* , 长度 d^* 和特征浓度 C_0^* 无量纲化, 可得描述浓度场的对流扩散方程:

$$u^{(0)} \frac{\partial C}{\partial x} + w_0 \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{1}{S_c} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{S_c} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{S_c} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (2.3.6)$$

其中

$$\omega_0 = \frac{\omega_0^*}{u_0^*} \quad S_c = \frac{\bar{u}_0^* d^*}{D^*} \quad (2.3.7)$$

边界条件为

$$\left. \begin{aligned} x=0 \quad C &= C_0(y, z) \quad (\text{给定的分布}) \\ x=L &= \frac{l^*}{d^*} \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad y = \pm 1 \quad \frac{\partial C}{\partial y} = 0 \\ z = \pm 1 \quad \frac{\partial C}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.3.8)$$

(2.3.6)中各系数 $u^0(y, z)$, ω_0 , $S_c(y, z)$ 已由前面的解求得。对(2.3.6)采用时间相关的算子分裂隐式格式数值求解,即

$$\left. \begin{aligned} x \text{ 方向} \quad & \frac{1}{3} \frac{C_{ijk}^{n+1/3} - C_{ijk}^n}{\Delta t} + u_{ik}^{(0)} \frac{\partial C_{ijk}^{n+1/3}}{\partial x} = \frac{1}{S_{cjk}} \frac{\partial^2 C_{ijk}^{n+1/3}}{\partial x^2} \\ z \text{ 方向} \quad & \frac{1}{3} \frac{C_{ijk}^{n+2/3} - C_{ijk}^{n+1/3}}{\Delta t} + \omega_0 \frac{\partial C_{ijk}^{n+2/3}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{S_{cjk}} \frac{\partial^2 C_{ijk}^{n+2/3}}{\partial z^2} \right) \\ y \text{ 方向} \quad & \frac{1}{3} \frac{C_{ijk}^{n+1} - C_{ijk}^{n+2/3}}{\Delta t} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{S_{cjk}} \frac{\partial^2 C_{ijk}^{n+1}}{\partial y^2} \right) \end{aligned} \right\} \quad (2.3.9)$$

其中 $i = 1, 2, \dots, N_x - 1$, $j = 1, 2, \dots, N_y - 1$, $k = 1, 2, \dots, N_z - 1$, N_x, N_y, N_z 为 x, y, z 三个方向所取的网格数。

为了避免差分方法可能带来的数值扩散或频散^{[5], [6]}, 采用谱方法对浓度 C_{ijk} 及其导数用 Chebyshev 多项式展开。为此作如下坐标变换以便将 x, y, z 化到其正交归一化区间

$$x' = \frac{x}{L/2} - 1 \quad y' = y \quad z' = \frac{z}{H} \quad (2.3.10)$$

因为离散方法对 x, y, z 各方向完全类似, 以下仅就 x 方向进行说明。坐标变换后 x 方向格式为(去掉¹⁾):

$$\frac{1}{3} \frac{C_{ijk}^{n+1/3} - C_{ijk}^n}{\Delta t} + \frac{2}{L} u_{ik}^{(0)} \frac{\partial C_{ijk}^{n+1/3}}{\partial x} = \left(\frac{2}{L}\right)^2 \cdot \frac{1}{S_{cjk}} \frac{\partial^2 C_{ijk}^{n+1/3}}{\partial x^2} \quad (2.3.11)$$

将浓度用 Chebyshev 多项式展开^[7, 8, 9]:

$$\left. \begin{aligned} C_{ijk} &= \sum_{i_x=0}^{N_x} \sum_{j_y=0}^{N_y} \sum_{k_z=0}^{N_z} C_{ixj_yk_z} h_{ix}(x_i) h_{j_y}(y_j) h_{k_z}(z_k) \\ h_{ix}(x_i) &= \delta_{ixi} = \begin{cases} 1 & i = i_x \\ 0 & i = 0 \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (2.3.12)$$

网格节点取为配置点

$$x_{ix} = \cos\left(\frac{i_x}{N_x} \pi\right) \quad i_x = 0, 1, 2, \dots, N_x \quad (2.3.13)$$

其一阶、二阶偏导数为:

$$\frac{\partial C_{ijk}}{\partial x} = \sum_{i_x=0}^{N_x} C_{ixjk} h'_{ix}(x_i) \quad (2.3.14)$$

$$\frac{\partial^2 C_{ijk}}{\partial x^2} = \sum_{i_x=0}^{N_x} C_{ixjk} h'_{i_x}(x_i) \quad (2.3.15)$$

其中

$$h'_{i_x}(x_i) = \begin{cases} \frac{\bar{C}_i(-1)^{i_x+i}}{C_{i_x}(x_i - x_{i_x})} & \text{当 } i = i_x \\ -\frac{x_{i_x}}{2(1-x_{i_x}^2)} & \text{当 } 1 \leq i \leq i_x \leq N_x - 1, \bar{C}_i = \begin{cases} 2 & i = 0, N_x \\ 1 & 1 \leq i \leq N_x - 1 \end{cases} \\ \frac{2N_x^2 + 1}{6} & \text{当 } i = i_x = 0 \\ \frac{2N_x^2 + 1}{6} & \text{当 } i = i_x = N_x \end{cases} \quad (2.3.16)$$

$$h'_{i_x}(x_i) = \sum_{m=0}^{N_x} h'_m(x_i) h'_{i_x}(x_m) \quad (2.3.17)$$

利用以上方法, 将坐标变换、浓度值及其偏导数代入(2.3.9)中各式, 即得计算格式。i 从 1 到 $N_x - 1$ 得 $N_x - 1$ 个方程, 加上两个边条件得 $N_x + 1$ 方程确定 $N_x + 1$ 个网格点上浓度值。对 j, k 循环, 则每一时间步需解 $(N_y - 1) \times (N_z - 1)$ 个 $N_x + 1$ 阶的代数方程组。t = 0 时刻浓度分布已知; 在求得 $n\Delta t$ 时刻浓度场后, 分三步完成一个时间步长的计算可得到 $(n + 1)\Delta t$ 时刻的浓度场。如此循环直至得到定常解。

图 3 给出了一个假设的浓度入口剖面经过电泳室后的分布图象。从入口和出口处的等浓度线图可以看出, 浓度剖面沿 y 方向形状与 y 方向速度剖面相似。这是因为纵向速度越慢, 微粒在电泳室内运动时间越长, 横向位移也越大, 因而靠近壁面的微粒位移比中间的微粒的位移要大。

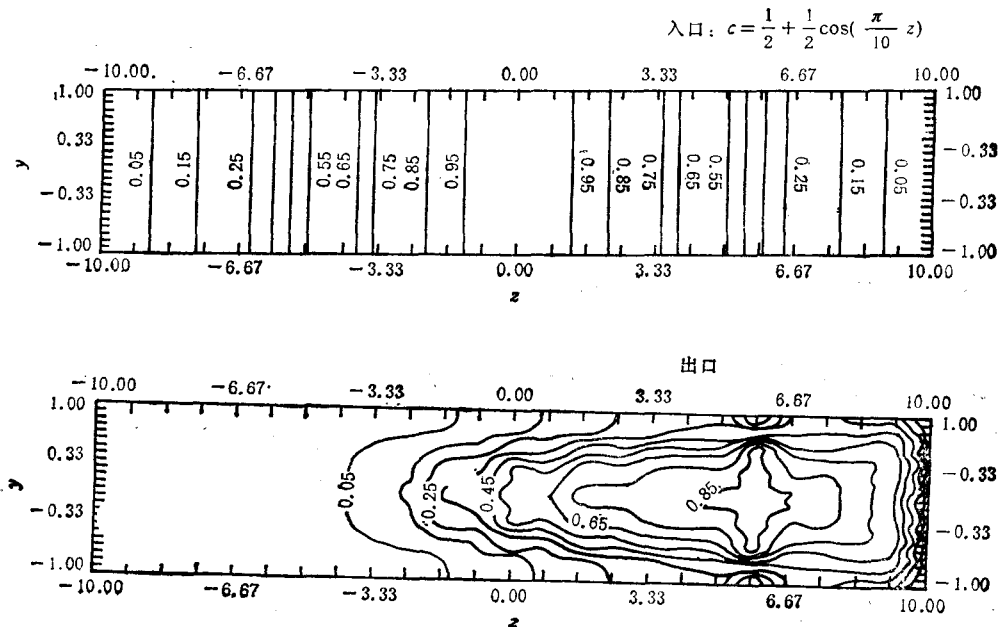


图 3 在入口和出口平面上的等浓度线图

三、结果和讨论

1. 速度场的变化规律

在本文讨论的参数范围内, 对流远远强于扩散($S_c \sim 10^5$), 浓度场的变化主要是对流的作用, 因而了解速度场的规律就比较重要。

横向速度场(z 方向)的变化较为简单: $\frac{W_0^*}{u_0^*} \propto \frac{q_0^*}{a_0^*} E_0^*$, 纵向速度则主要受到重力环境、压力梯度和电场强度的影响。

重力环境对纵向速度的影响见图 4。在通常重力下, $N_3 \sim 1-10$, 温度效应明显, 易产生回流, 使可供分离微粒的区域大大减小。微重力下 $N_3 \sim 10^{-2}$, 温度效应较弱, 一般不会产生回流; 此时 N_2 也较小, 重力影响不大。从图 4 中可见, 0.01g 与 0.0001g 的速度剖面几乎重合。微重力下温度效应较弱和重力影响较小使调整电泳装置参数时不会大幅度影响流场, 有利于更好地分离。

通常重力下电场强度和压力梯度对 $u^{(0)}$ 的影响较显著(见图 5)。因 $N_3 \propto \frac{E_0^{*2}}{u_0^*}$, 由电场强度减小或压力梯度增加, 都可抑制回流。并且电场强度增加到原来两倍和压力梯度

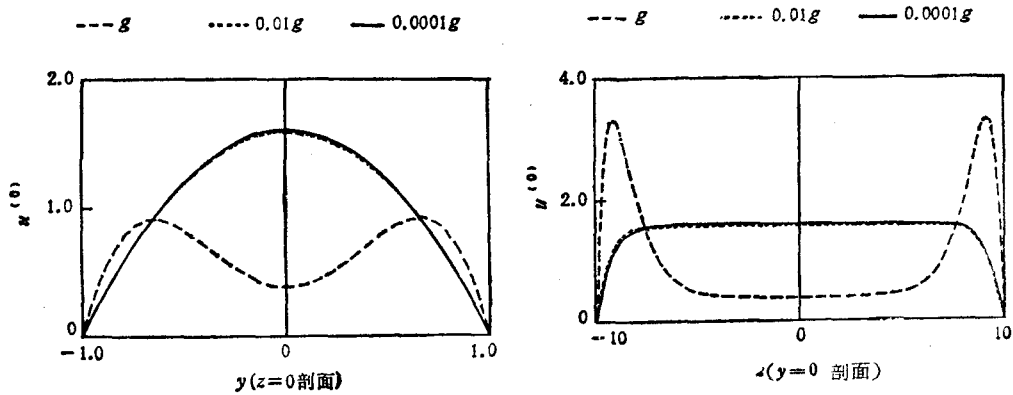


图 4 重力环境对纵向速度 $u^{(0)}$ 的影响

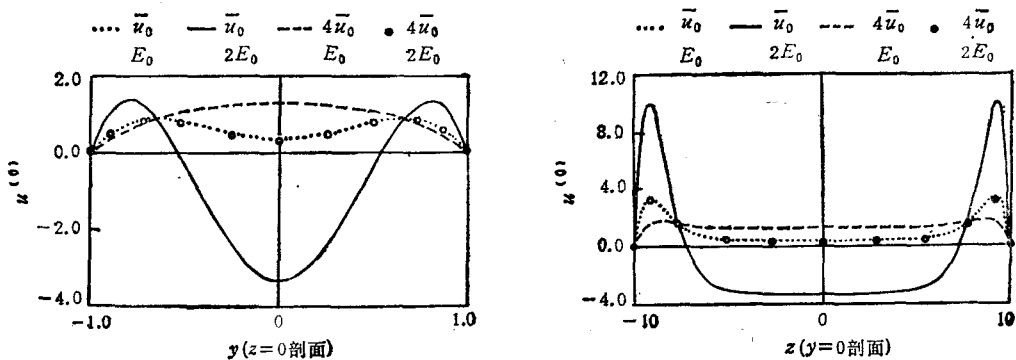
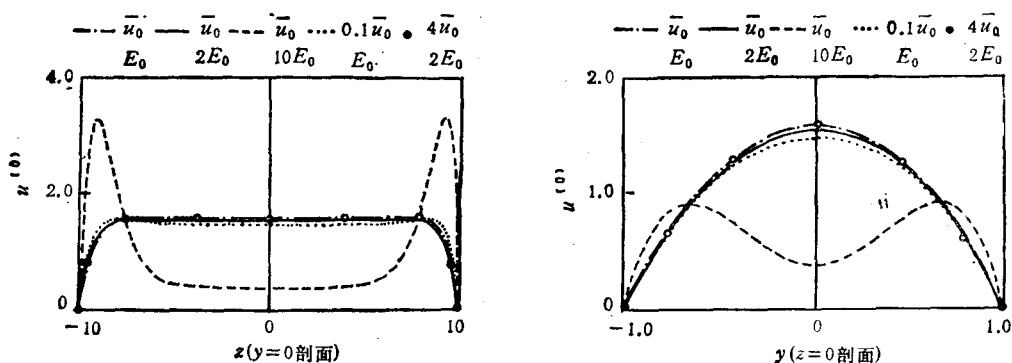


图 5 通常重力下压力梯度(或平均流速)和电场强度对 $u^{(0)}$ 的影响

图 6 微重力下压力梯度和电场强度对 $u^{(0)}$ 的影响

增加到四倍时的影响相互抵消, 速度剖面与原来几乎完全重合。而在微重力环境(见图 6), 电场强度和压力梯度改变与重力环境相同时, $u^{(0)}$ 基本不变; 当电场强度和压力梯度有很大变化时, $u^{(0)}$ 才有明显改变。可见, 在微重力环境, 由于重力的减弱, 电场强度和压力梯度对纵向速度的影响相应减弱, 也就使温度效应减弱。这样, 电场强度和压力梯度在不明显改变速度场的前提下就有了较大的调节范围, 以便更好地分离不同物性的微粒: 既可增大不同微粒的分离程度, 又降低了对物性差别最小限度的要求。

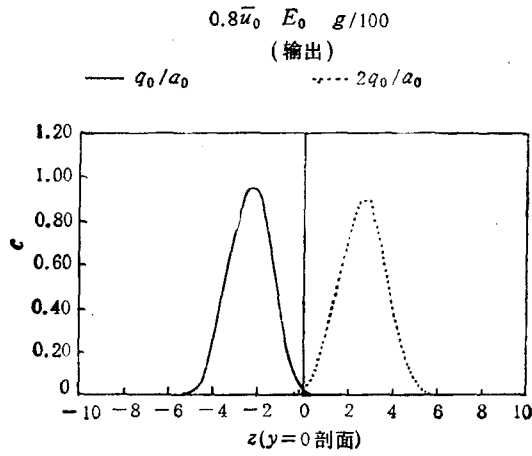
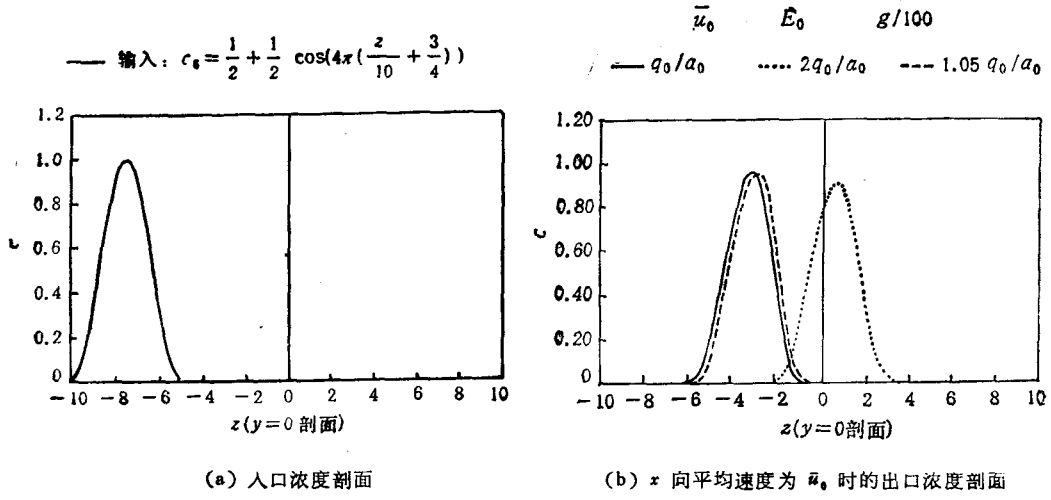
2. 浓度场

为了便于研究浓度场变化规律, 可在电泳室入口处给定简单波形的浓度分布, 如方波、正弦波等。样品入口处的位置合理可以增加横向分离的有效距离。例如, 电性相同的微粒可从同性电极附近入口; 电性相反的微粒可从两电极向某处入口。从简单波形的位置、形状的变化, 即可了解浓度场的变化规律和分离效果。

要想得到好的分离效果, 在重力环境确定的情况下, 对于特定的样品, 主要靠调整电场强度和压力梯度。既要尽量增大分离程度, 又要注意避免回流和防止在壁面电极上沉淀, 这两者是相互制约的。因为要增大分离程度要求减小压力梯度和增大电场强度以增加横向速度与纵向速度的比值, 而这样就容易造成迴流或沉淀; 因此, 压力梯度的减小和电场强度的增加都有一定的阈值, 不同物性的样品分离程度也就受到了限制。在本模型中描述物性的参数 $\frac{q_0^*}{a^*}$ 差别越大, 越易分离。例如, 对于等价球半径相同、带电量分别为 q_0^* , $1.05q_0^*$, $2q_0^*$ 的微粒, 假设入口时浓度剖面都如图 7a。 q_0^* 和 $1.05q_0^*$ 的微粒由于差别太小, 在通常重力和微重力下都不能很好地分离; 对于带电量为 q_0^* 和 $2q_0^*$ 的不同微粒, 在微重力下可以减小压力梯度(或增加场强)来很好地分离(见图 7b, 7c)而在通常重力下, 由于有迴流趋势使电泳室中间和靠近壁面处速度差别大且变化较大(见图 4), 使浓度的集中程度减弱而不能分离, 如把入口剖面放在中间速度变化平缓处, 则因横向距离太小也不能分离。

3. 浓度场的拟三维算法

根据浓度场扩散很弱的特点, 可以简化计算格式。在(2.3.6)中略去 y 方向的扩散项(小量), 方程的椭圆性质不变:



(c) x 向平均速度为 $0.8\bar{u}_0$ 时的出口浓度剖面
 图 7 微重力环境 ($0.01g$) 不同微粒的分离

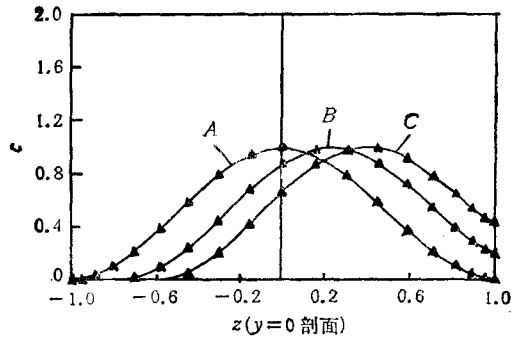


图 8 拟三维算法(Δ)与三维算法(—)所得浓度剖面的比较
 图中 A、B、C 分别表示入口($x=0$)中间过程($x = \frac{L}{2}$)和出口($x=L$)处浓度剖面

$$u_0 \frac{\partial c}{\partial x} + w_0 \frac{\partial c}{\partial z} - \frac{1}{S_c} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{S_c} \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (3.3.1)$$

这样,在求解出速度场和温度场后,取定某个 y 值和该处的速度、温度值,在此 $x-z$ 平面上采用(3.3.1)求解浓度场。这是一种拟三维算法,它可使计算量大大减小。一般只须计算几个不同 y 处的 $x-z$ 截面上的浓度场即可知整个浓度场的概况。由图 8 可知,这种拟三维算法与三维算法结果基本相同(在其他 $x-z$ 截面上情况类似),因此值得在工程实际的辅助设计中运用。

参 考 文 献

- [1] 陶祖莱. 力学进展, 1990, 20(1): 69
- [2] Saville DA. Phys Chem Hydrodyn, 1980. 1:297
- [3] 袁凡, 吴望一. 应用数学和力学, 1987, 8(1): 17—30
- [4] 郭向东, 吴望一. 北京大学学报(自然科学版), 1987. (1): 39—48
- [5] 吴江航, 韩庆书, 计算流体力学的理论、方法和应用. 北京: 科学出版社, 1988
- [6] 冯康等. 数值计算方法. 北京: 国防工业出版社, 1978
- [7] Gottlieb D, Orszay SA. Numerical analysis of spectral methods: theory and applications. 1977
- [8] Voigt RG et al. Spectral methods for partial differential equations. 1984
- [9] 蒋伯诚等. 计算物理中的谱方法. 北京: 湖南科学技术出版社, 1989

THREE-DIMENSIONAL ANALYSIS OF THE CONCENTRATION IN AN ELECTROPHORESIS CHAMBER WITH CONTINUOUS FLOW

Li Song Wen Gongbi Yan Zongyi

(Department of Mechanics, Peking University, Beijing 100871, China)

Tao Zulai

(Institute of Mechanics, Academy Sinica, Beijing 100080, China)

Abstract This paper studies the separation process of different particles in a suspension continuously flowing through a square electrophoresis chamber under the action of a transverse electric field. Three-dimensional temperature, velocity and concentration fields as well as their interactions are taken into consideration, for the first time, and the effects of various parameters under micro-gravity and usual gravity are demonstrated through numerical simulations. A new quasi-three-dimensional approach is proposed, which can yield results in agreement with those by a true three-dimensional approach, but with much less computational efforts.

Key words electrophoresis, micro-gravity, concentration field, numerical simulation