

Математическое моделирование в электрогидродинамике

И. Л. Панкратьева, В. А. Полянский
(МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва)

При математическом моделировании электрогидродинамических явлений основная трудность связана с включением в модель физических параметров, сведения о которых весьма неопределены. Возникает потребность в разработке математических моделей с минимальным набором «эффективных» искомых переменных и задаваемых параметров. В работе описаны три модели возрастающей сложности и приведены результаты, полученные в рамках каждой из них.

Ключевые слова: электрогидродинамика, электрическое поле, слабопроводящие среды, математические модели, объемный электрический заряд, электрохимические реакции, электризация.

Многокомпонентные слабопроводящие среды, взаимодействующие с электрическими полями, широко используются в различных современных технологиях. Можно отметить, например, устройства с микро- и нано-размерными каналами, применяемыми в биотехнологических и фармацевтических исследованиях для транспортировки нанобъемов жидкости, анализа биологических образцов, изменения состава смеси в микрообъемах, медицинской экспресс-диагностики и т. п. Особенность таких сред связана с наличием объемного электрического заряда, время релаксации которого порядка характерного гидродинамического времени. Объемный заряд позволяет с помощью внешних приложенных электрических полей управлять движением среды. При математическом моделировании взаимодействия слабопроводящих сред с электрическими полями основная трудность связана с необходимостью включения в модель большого числа физических параметров, сведения о которых в литературе либо весьма скудны, либо отсутствуют. К ним относятся ионный состав среды, свойства переноса ионных компонент, параметры объемных и поверхностных электрохимических процессов с участием ионов, условия на границах раздела для концентраций заряженных частиц.

Методы построения моделей многокомпонентных химически реагирующих смесей при наличии электромагнитных полей в механике сплошных сред известны [1] и в литературе описаны модели, обладающие «всеобщностью», однако, их практическая ценность не велика из-за неопределенности в значениях многочисленных параметров, входящих в модель. Поэтому возникает потребность в системном подходе к проблеме, состоящем в разработке математических моделей с минимальным набором «эффективных» искомых переменных и задаваемых параметров, которые позволяют описывать те или иные электрогидродинамические (ЭГД) явления с достаточной адекватностью и полнотой. Ниже обсуждаются три модели возрастающей степени сложности (униполярная, бинарная и трех-ионная).

Математическая формулировка всех моделей, описывающих электрогидродинамические течения, содержит уравнения движения среды в целом и уравнения Пуассона для поля и потенциала [1]:

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = q\mathbf{E} - \nabla p + \eta \Delta \mathbf{u}, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\varepsilon \operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi q, \quad \mathbf{E} = -\nabla F. \quad (2)$$

Здесь \mathbf{u} , p , ρ , η — скорость, давление, плотность и динамическая вязкость несущей среды, q , \mathbf{E} , F — плотности объемного заряда, напряженность поля и электрический потенциал, ε — диэлектрическая проницаемость. В (??) входит влияющая на движение среды кулоновская сила, пропорциональная плотности объемного заряда q . С нахождением q и связаны основные трудности в решении задач ЭГД.

Уравнения для определения q удобно записать сразу для трех-ионной модели, поскольку униполярная и бинарная модели являются ее упрощениями:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_1}{\partial t} + \operatorname{div}(n_1 \mathbf{U}_1) &= w - \alpha n_1 n_2, \\ \frac{\partial n_2}{\partial t} + \operatorname{div}(n_2 \mathbf{U}_2) &= w - \alpha n_1 n_2 - \beta n_2 n_3, \\ \frac{\partial n_3}{\partial t} + \operatorname{div}(n_3 \mathbf{U}_3) &= -\beta n_2 n_3, \end{aligned} \quad (3)$$

$$n_i \mathbf{U}_i = n_i \mathbf{u} + \operatorname{sign}(e_i) n_i b_i \mathbf{E} - D_i \nabla n_i, \quad i = 1, 2, 3,$$

$$q = \sum e_i n_i, \quad \mathbf{J}_s = \sum e_i n_i \mathbf{U}_i + \frac{\varepsilon}{4\pi} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}.$$

Здесь n_i , b_i , D_i , e_i — концентрация, коэффициенты подвижности и диффузии и заряд ионов (при этом считается, что $e_1, e_3 > 0$, $e_2 < 0$), w ,

a, β — скорость объемной ионизации и коэффициенты рекомбинации. Величина w может зависеть от напряженности поля. Для гидродинамических параметров используются обычные граничные условия, для поля задается электрический потенциал на границах.

Граничные условия для уравнений (??), полученные из баланса потоков ионов на границу, можно представить в общем виде [2]:

$$n_i \mathbf{U}_i \cdot \boldsymbol{\nu} = A_i^k(E, n_m, \dots) - K_i^k n_i. \quad (4)$$

Здесь $\boldsymbol{\nu}$ — внешняя нормаль к границе раздела, A_i^k, K_i^k — эффективные параметры поверхностных электрохимических процессов, характеризующих, соответственно, потоки ионов за счет ионизации и рекомбинации на границах раздела ($k = 1, 2$).

Наиболее используемая в литературе модель — это модель униполярно заряженной среды, содержащей только один сорт заряженных частиц (в (??)) $i = 1$). Физический механизм, приводящий к возникновению такой среды, связан с электрохимическим процессом на заряженном электроде, в результате которого на его поверхности образуются ионы того же знака, что и электрод, при этом за счет электростатического отталкивания происходит инжекция заряженных частиц в среду. В модель входят два задаваемых параметра — подвижность ионов и значение концентрации ионов на поверхности электрода q_w . Величину подвижности ионов можно получить экспериментально. Концентрация ионов на поверхности электрода из экспериментов не определяется и фактически является неизвестным параметром модели, но может быть найдена из решения обратной задачи путем сравнения расчетных и экспериментально наблюдаемых характеристик ЭГД течения. Например, из решения задачи об устойчивости слоя слабопроводящей жидкости между двумя электродами при наличии приложенного поля можно получить пороговое значение q_w , при котором неподвижный слой теряет устойчивость и возникают конвективные ячейки в виде цилиндрических валов или ячеек Бенара. На основе униполярной модели исследован широкий класс электрогидродинамических течений: возникновение конвективных ячеек между электродами с увеличением приложенного напряжения; вихревые течения от электрода в виде лезвия или иглы в каналах различной конфигурации и т. д. Отметим, что в рамках униполярной модели, примененной для сжимаемых сред, обнаружен новый тип разрывных решений — ударные волны, на фронте которых образуется поверхностный электрический заряд [3].

Бинарная модель дает возможность более адекватно описать физический механизм взаимодействия среды с электрическим полем, поскольку изучаемые в ЭГД среды реально содержат в виде малых примесей заряженные частицы разных знаков. Модель строится следующим образом [4]. Все примесные ионы разбиваются на два сорта положительно и отрицательно заряженных частиц с некоторыми эффективными концентрациями n_i и подвижностями b_i (в (??) $i = 1, 2, \beta = 0$). В объеме среды протекают реакции диссоциации нейтральных молекул примеси на положительные и отрицательные ионы с некоторой эффективной скоростью $w(E, T, \dots)$ и рекомбинации ионов с коэффициентом a . Скорость диссоциации может зависеть от напряженности электрического поля. На поверхности раздела происходят рекомбинация ионов с образованием нейтральных молекул и обратный процесс ионизации (??). Очевидно, что для записи потока, обусловленного поверхностным процессом, необходимо вводить минимум два параметра для каждого сорта ионов на всех границах.

В рамках этой модели исследованы важные практические задачи об электризации углеводородных жидкостей при их течении в каналах в отсутствие приложенных полей [5, 6].

Электризация за счет поверхностных процессов позволяет применять микроканал с жидкостью для работы в режиме насоса при заданном продольном электрическом поле. Такого типа насосы широко используются в биологических исследованиях, в медицинских диагностических чипах, в фармацевтике.

На основе бинарной модели исследован механизм электрокинетической электризации среды в сильных неоднородных полях, обусловленный зависимостью от поля скорости объемной диссоциации. В рамках этого механизма можно объяснить наблюдаемые в эксперименте струйные течения от изолированного электрода, не используя представления об инжекции ионов с поверхности.

Достаточной для интерпретации имеющихся экспериментальных данных общностью обладает модель с тремя сортами ионов. С её помощью можно интерпретировать во всем диапазоне приложенных напряжений вольт-амперную характеристику электролитической ячейки — устройства, при помощи которого измеряют проводимость среды. В рамках этой же модели была доказана возможность существования в жидкостях самоподдерживающихся тричелевских пульсаций тока при постоянном приложенном поле [7].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 16-01-00157.

Список литературы

- [1] Гогосов В. В., Полянский В. А., Семенова И. П., Якубенко А. Е. Уравнения электрогидродинамики и коэффициенты переноса в сильном электрическом поле // Изв. РАН. МЖГ. — 1969. — № 2. — С. 31–45.
- [2] Вартанян А. А., Гогосов В. В., Полянский В. А., Полянский К. В., Шапошникова Г. А. Моделирование нестационарных процессов в каналах ЭГД-насосов // Известия РАН. МЖГ. — 1994. — № 3. — С. 30–41.
- [3] Gogosov V. V., Polyansky V. A. Shock waves in electrohydrodynamics // Progress in Aerospace Sciences. — Pergamon Press, 1983. — V. 20. — P. 125–216.
- [4] Панкратьева И. Л., Полянский В. А. Моделирование электрогидродинамических течений в слабопроводящих жидкостях // ПМТФ. — 1995. — Т. 36. № 4. — С. 36–44.
- [5] Touchard G. Flow electrification of liquids // J. of Electrostatics. — 2001. — V. 51–52. — P. 440–447.
- [6] Панкратьева И. Л., Полянский В. А. Электризация слабопроводящих жидкостей вблизи стенки // Известия РАН. МЖГ. — 2006. — № 2. — С. 3–16.
- [7] Polyansky V. A., Pankratieva I. L. Electric current oscillations in low-conducting liquids // J. of Electrostatics. — 1999. — V. 48. — P. 27–41.