

文章编号:1008-5548(2022)04-0134-07

doi:10.13732/j.issn.1008-5548.2022.04.015

基于电热耦合效应的插入式电极有限元仿真及优化

李江涛^{1,2}, 李晓光³, 孙健³, 刘岳强³, 郑浩³, 张祥雷¹, 宁辉³, 李子瑞²

(1. 河北工业大学 机械工程学院, 天津 300401; 2. 温州大学 机电工程学院, 浙江 温州 325035;
3. 丹东百特仪器有限公司, 辽宁 丹东 118009)

摘要:为提高插入式电极的测量精度,减小测试区域电场及焦耳热对纳米颗粒Zeta电位测量结果稳定性的影响,通过对插入式电极进行多物理场的数值模拟,研究电极底部极片结构布置对测试区域电场及温度分布的影响,并通过实验对所选电极结构进行验证。结果表明:当插入式电极极片长度为8 mm,极片宽度为6 mm,极片间距为4 mm时测试结果的标准偏差更小,所检测颗粒Zeta电位的标准差为0.98 mV,测试稳定性及测量精度更高。

关键词:插入式电极; 电热耦合; 优化设计

中图分类号:TH6

文献标志码:A

Finite element simulation and optimization of insertion electrode based on electrothermal coupling effect

LI Jiangtao^{1,2}, LI Xiaoguang³, SUN Jian³, LIU Yueqiang³, ZHENG Hao³,
ZHANG Xianglei¹, NING Hui³, LI Zirui²

(1. School of Mechanical Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China;
2. College of Mechanical and Electrical Engineering, Wenzhou University, Wenzhou 325035, China;
3. Bettersize Instruments Ltd, Dandong 118009, China)

Abstract: In order to improve the measurement accuracy of the insertion electrode and reduce the influence of electric field and Joule heat on the stability of Zeta potential measurement results, multi-physical field numerical simulation of the insertion electrode was carried out to study the influence of the electrode bottom electrode layout on the electric field and temperature distribution in the test area, and the accuracy and stability of the selected electrode were verified by experiments. The results show that when the electrode length is 8 mm, the electrode width is 6 mm, and the electrode spacing is 4 mm, the standard deviation of the test results is smaller. The standard deviation of Zeta potential was 0.98 mV and the insertion electrode has better stability and accuracy.

Keywords: insertion electrode; coupling of electricity and heat; optimization design

颗粒悬浮液Zeta电位是衡量胶体体系的重要指标^[1],已在食品^[2]、化工^[3]、环境^[4]、医学^[5]等领域得到广泛应用。当利用电泳光散法检测颗粒表面Zeta电位时,入射激光照射在测试电极内电泳颗粒并引起散射光多普勒效应,然后根据散射光的相位变化或频移得到颗粒Zeta电位^[6-10],但电泳颗粒的物性参数在检测过程中易受外界环境的影响,当使用毛细管电极检测颗粒表面电位时,壁面电渗流及底部的电场不均会影响颗粒的运动状态,进而影响测试结果的精度及稳定性,可以通过施加高频交变电压^[11-13]或电极结构设计进行优化^[14]。当使用插入式电极测量高浓度有机悬浮液颗粒的Zeta电位时,电极极片测试间距过小,测试区域电场分布易受极片尺寸的影响,测试区域温度的提高也会影响待测液性质及颗粒的运动状态,使得测试结果误差增大。当前针对插入式电极的结构优化,没有成熟的设计

收稿日期:2022-03-09,修回日期:2022-05-31。

基金项目:国家自然科学基金项目,编号:12072100。

第一作者简介:李江涛(1996—),男,硕士研究生,研究方向为多物理场仿真及优化。E-mail: 1738144236@qq.com。

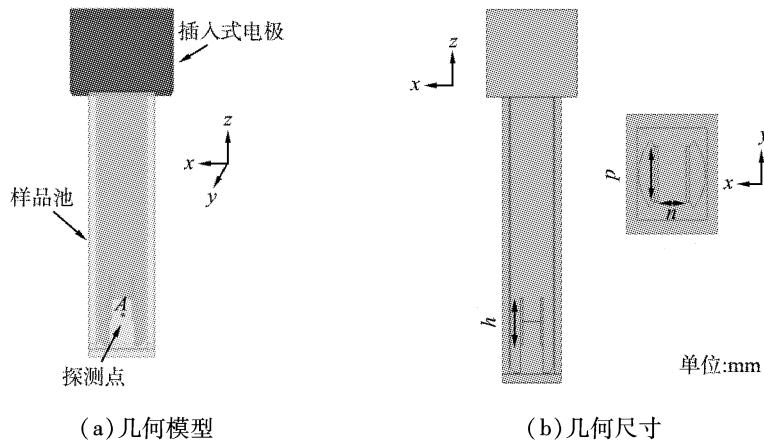
通信作者简介:宁辉(1978—),男,博士,研究方向为胶体物理和分析仪器研制。E-mail: hui ning@bettersize.com。

理论及方法。鉴于此,本文中以颗粒 Zeta 电位的检测装置插入式电极为研究对象,基于有限元原理对其进行电热耦合效应的数值模拟,讨论电极结构对测试区域电场及温度分布的影响,并通过实验验证优化后插入式电极的精度及稳定性,为插入式电极的优化设计提供依据。

1 研究系统

1.1 几何模型

插入式电极的几何模型如图 1(a)所示,该结构由电极插头和样品池构成,电极片位于样品池底部,当注入适量待测溶液并接通电源,激光照射在底部探测区的颗粒发生散射,在另一侧完成散射信号收集分析。几何尺寸如图 1 所示,样品池高度为 48 mm,外壁面宽度为 13 mm,内壁面宽度为 10 mm。



图注: h 、 p 、 n 分别表示底部电极片的长度、宽度、极片间距。

图 1 插入式电极的结构示意图

Fig. 1 Schematic diagram of insertion electrode

插入式电极在检测的过程中所处环境较为复杂,为了简化数学模型,根据其实际工况对边界条件作出合理性假设:1)样品池、包裹电极片的塑料完全绝缘,不漏电,浸没在溶液部分电极片与溶液接触良好;2)忽略电极片在包裹中的发热,只考虑和溶液间的电热效应;3)忽略恒温箱的保温效应,仅考虑样品池外壁面的热交换为对流和辐射散热,辐射散热量比较小,此处被忽略;4)为减小计算量,不考虑施加高电压的瞬态发热状态,仅讨论稳态直流作用下的电热耦合效应。

1.2 物理模型

1.2.1 能量方程

插入式电极检测过程中的温度分布及热量传递由能量方程表示:

$$\rho C \frac{\partial P}{\partial t} + \rho Cu \nabla T = K \nabla^2 T + q \quad (1)$$

式中: K 为待测溶液的导热系数, $\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$; C 为待测溶液的恒压比热容, $\text{J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$; ρ 为待测溶液密度, kg/m^3 ; T 为电极温度, $^\circ\text{C}$; q 为单位体积内溶液产生的焦耳热, J/m^3 。

对流热通量

$$Q = h(T_e - T) \quad (2)$$

式中: Q 为电极与外界的对流热通量, W/m^2 ; h 为表面对流换热系数, $\text{W}/(\text{m}^2\cdot\text{C})$; T_e 为外界流体温度, $^\circ\text{C}$ 。

1.2.2 拉普拉斯方程

电极内部电场分布由拉普拉斯方程控制:

$$\nabla (\sigma(T) \nabla \phi) = 0, \quad (3)$$

$$E = -\nabla \phi . \quad (4)$$

式中: $\sigma(T)$ 为待测溶液的电导率, S/m ; ϕ 为所施加电场的电势, V ; E 为电场强度, V/m 。

1.2.3 电热耦合模型

电热耦合模型中, 电导率、黏度等物性参数为温度的函数, 假设待测液的缓冲溶液为氯化钠盐溶液^[15~16]。由式(5)可知, 非均匀电场产生的焦耳热主要受溶液电导率和场强影响, 此时内热源为

$$q = \sigma(T) E^2 , \quad (5)$$

$$\sigma(T) = 0.0126 [1 + 0.025(T - 298)] C . \quad (6)$$

式中: C 为待测溶液浓度, mol/m^3 。

1.3 边界条件及网格划分

利用有限元软件 Comsol Multiphysics 对插入式电极进行电热多物理场仿真, 样品池初始温度与外界温度一致, 内外温度均为 293.15 K, 样品池外壁面与环境进行对流换热, 材料的物性参数如表 1 所示。

网格划分影响数值模拟结果的准确性, 模型采用自由三角形网格划分, 并对计算域进行自定义加密处理。为了减小网格数目对计算精度的影响, 需要进行网格独立性检验, 当施加电压为 15 V, 浓度为 5 mol/m³ 时, 探测点 A 的温度随网格数目的变化如图 2 所示。当网格数小于 2×10^6 时, 探测点温度波动较大; 当网格数大于 2×10^6 时, 该点温度趋于平缓。

表 1 电极材料的物性参数

Tab. 1 Physical parameters of the electrode material

材料	恒压热容/(J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹)	密度/(kg·m ⁻³)	导热系数/(W·m ⁻¹ ·K ⁻¹)	相对介电常数	电导率/(S·m ⁻¹)
电极片	133	21 450	71.6	1	8.9×10^6
待测液	4 180	1 000	0.61	78.5	$0.0126 [1 + 0.025(T - 298)] C$

注: T 为电极温度; C 为待测液浓度。

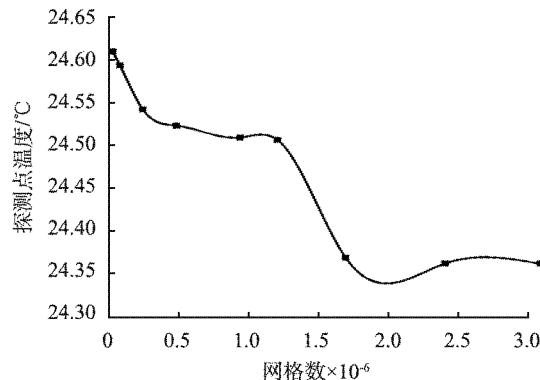


图 2 探测点温度随网格数目的变化曲线

Fig. 2 Temperature curve of probe point with the number of mesh

2 仿真结果与讨论

2.1 插入式电极电场分析

测试区域电场分布影响颗粒的电泳运动, 当电极片施加 10 V 电压, 浓度为 5 mol/m³ 时, 底部电极片长度为 8 mm, 宽度为 10 mm, 极片间距为 4 mm, 插入式电极测试区域不同截面的场强分布如图 3 所示。随着浸没深度的增加, 极片间场强分布比较均匀, 由于电场的边缘效应, 电极片底部尖角处在周围产生较大的场强梯度, 且极片底部与溶液接触处出现内凹式场强变化。电极片 4 个尖角处的场强较大, 中间测试区域场强整体呈蝶状分布, 溶液前后也呈现内凹式场强梯度。

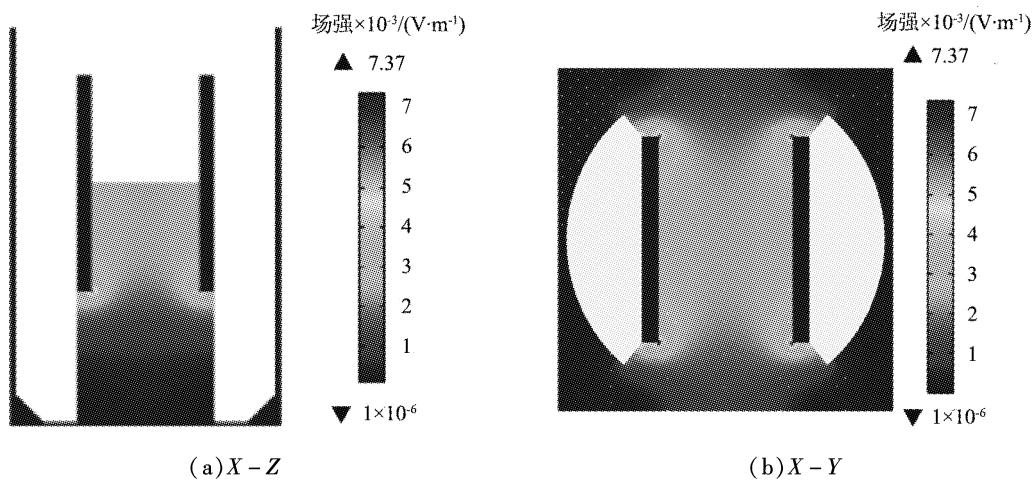


图 3 插入式电极截面场强分布

Fig. 3 Electric field intensity distribution of insertion electrode electrode's sections

电极结构对测试区域场强的影响如图 4 所示。当电极片宽度及间距不变, 极片长度为 6、8、10 mm, 沿激光入射方向探测点所在三维截线的场强分布如图 4(a) 所示。随着电极片有效长度的增加, 极片间场强的均匀度不断增加, 且曲线整体场强差减小, 但是探测区域的有效测试面积增加。当极片长度为 6 mm 测试点场强仅为 2 200 V/m 左右, 随极片长度的增加, 探测点所处位置的场强受溶液的影响减小, 当极片长度为 8、10 mm 时, 探测点场强接近在 2 400 V/m 左右。

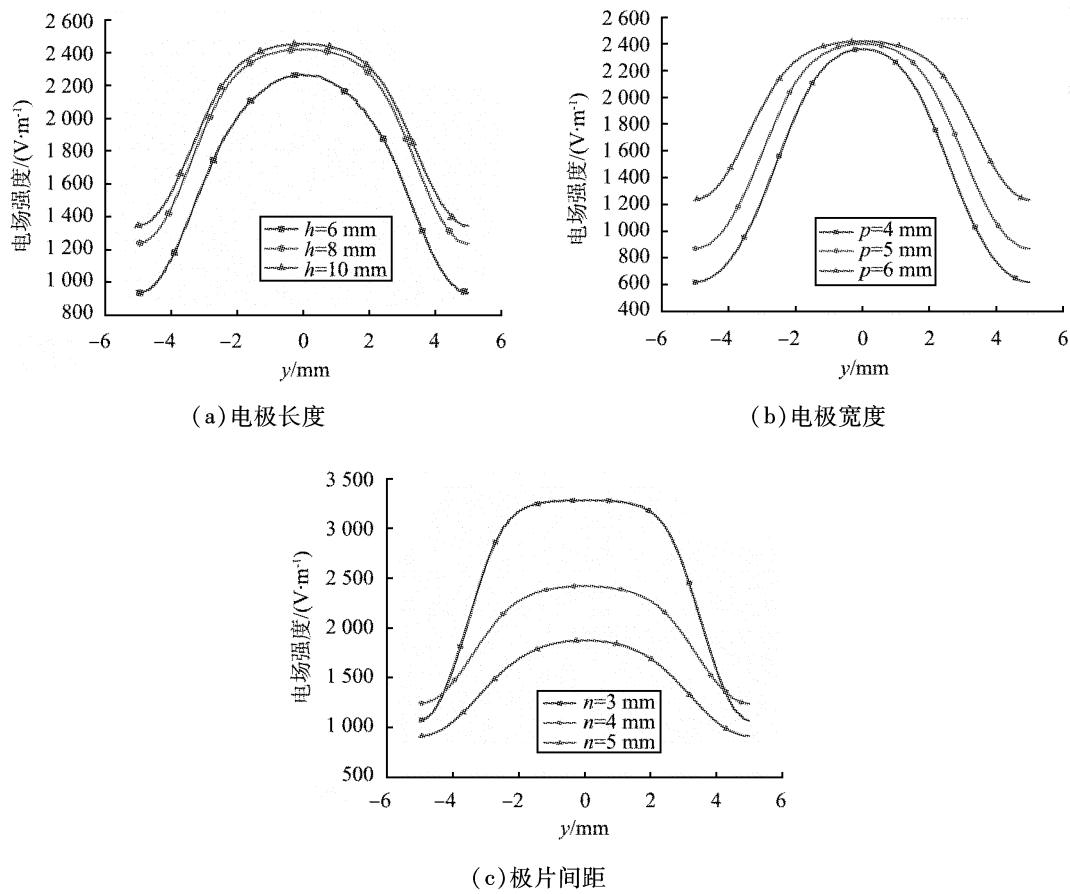


图 4 电极片结构对测试区域场强的影响

Fig. 4 Influence of electrode structure on Electric field intensity of test area

图4(b)描述电极片宽度对测试区域场强分布的影响。随着电极宽度的增加,测试区域电场分布受溶液的影响逐渐变小,测试区域的有效宽度增加。图4(c)为电极间距对测试区域场强分布的影响。随极片间距的减小,均匀性不断增加,但在探测点左右1 mm区间内电场分布较均匀。

2.2 插入式电极温度场分析

当电极片施加10 V电压,浓度为 $5 \text{ mol}/\text{m}^3$,底部电极片长度为8 mm,宽度为10 mm,电极间距为4 mm时,插入式电极不同截面温度分布如图5所示。由图可知,插入式电极的整体温度从两极片间测试区域逐渐向上及周围递减,其中极片间的温度较高,整体温差为13.9 °C。在X-Y截面,测试区域温度整体呈环状分布,并向周围逐级递减,极片间测试区域温度分布较为均匀,温度梯度较小。

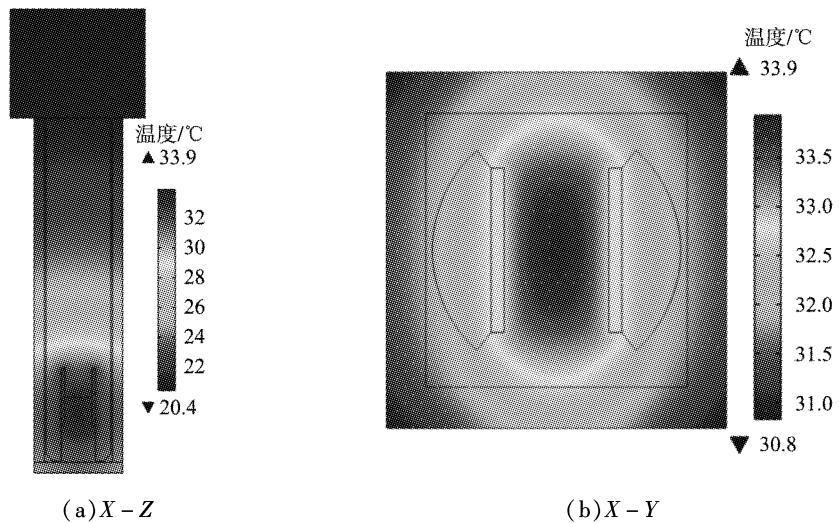


图5 插入式电极截面的温度分布

Fig. 5 Temperature distribution of insertion electrode's sections

当插入式电极施加10 V电压,缓冲液浓度为 mol/m^3 ,电极结构对测试区域的温度的影响如图6所示。测试中心探测点温度随着电极淹没深度的增大而增大,同时在测试区域整体温差不大。当电极长度为6~12 mm,稳态时探测点温度从27 °C上升到47 °C,增大了74%。电极宽度从4 mm增加到6 mm,测试区域整体温度不断增大,探测点温度从30 °C增加到34 °C,增大了13%。测试区域温度随着电极间距的增加而减小,这是由于电极片首先加热极片间的流体,热量通过传导及对流向其他流体区域扩散,所加热的液体体积随极片间距的增大而增大。

3 实验验证

通过对插入式电极电场及热场的有限元仿真,确定插入式电极的最优结构布置。随极片宽度的增加,测试区域电场均匀度不断增大,同时探测点的温度变化较小,通过对电极电场均匀度及温度综合考虑,选定电极极片宽度为6 mm。随着电极长度的增加,测试区域有效面积随之增大,但其对测试区域的温度影响较大,会对颗粒运动状态产生影响,因此极片长度不能过长,选取极片长度为8 mm。随着极片间距的减小,测试区域场强越均匀,但是极片间距对测试区域的温度影响较小,考虑电极制造公差,选取极片间距为4、3 mm。

为了验证所选电极的稳定性及测试精度,利用BeNano 90 Zeta型颗粒Zeta电位测试仪(丹东百特仪器有限公司)对上述电极进行验证。测试样品为标准样品聚苯乙烯乳胶微球颗粒(丹东百特仪器有限公司),其标称Zeta电位为 (39 ± 5) mV,分散介质为蒸馏水。仪器实验温度为25 °C,使用交变电场模块,设置测试次数为10。

为了保持不同间距下电场一致,3 mm间距电极施加7.5 V电压测试,4 mm间距电极施加10 V电压测试,每个型号电极进行分别测试,其结果如表3、4所示。

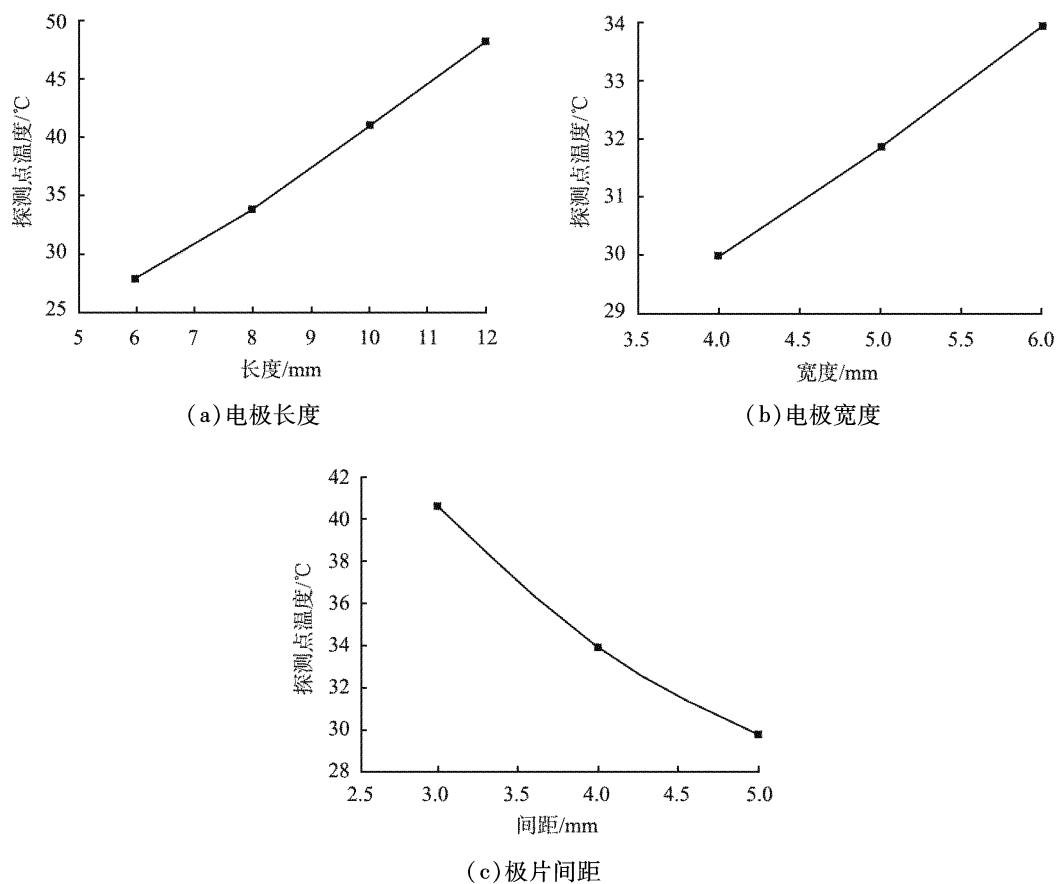


图 6 电极结构对测试区域温度的影响

Fig. 6 Influence of electrode structure on temperature of test area

表 3 极片间距为 3 mm 时电极 Zeta 电位测试结果

Tab. 3 Electrode Zeta potential test results with electrode spacing of 3 mm

编号	Zeta 电位/mV	标准差/mV	重复性/%	编号	Zeta 电位/mV	标准差/mV	重复性/%
1	-40.77	1.11	2.73	5	-42.23	0.71	1.69
2	-36.92	1.10	2.99	6	-38.19	1.02	2.68
3	-40.26	1.60	3.97	7	-43.37	0.83	1.91
4	-40.21	1.13	2.81				

表 4 极片间距为 4 mm 时电极 Zeta 电位测试结果

Tab. 4 Electrode Zeta potential test results with electrode spacing of 4 mm

编号	Zeta 电位/mV	标准差/mV	重复性/%	编号	Zeta 电位/mV	标准差/mV	重复性/%
1	-40.39	0.590	1.42	5	-39.57	0.675	2.43
2	-38.55	0.660	4.63	6	-39.78	0.653	3.82
3	-38.99	0.648	1.56	7	-37.64	0.641	3.42
4	-40.25	0.604	2.81				

从测试结果可以看出,极片间距为 3 mm 测试电极所测颗粒表面 Zeta 电位的平均值为 -40.28 mV, 标准差为 2.21 mV; 间距为 4 mm 电极所测结果的平均值为 -39.31 mV, 标准差为 0.98 mV。对于 2 个不同型号电极而言,每次测试的重复性均在标准范围内,相比间距为 3 mm 的电极,间距为 4 mm 样品池测试结果的标准偏差更小,稳定性更好。

4 结论

基于电热耦合效应对插入式电极进行数值模拟,分析讨论电极极片尺寸对测试区域的电场分布及温度的影响,优化电极极片的结构并进行实验验证,得到以下结论:

1) 插入式电极电场及温度分布受底部极片尺寸的影响,随电极长度的增加,测试区域的有效测量面积随之增加,但溶液的温度变化较大;随极片宽度的增加,测试区域电场均匀度不断增大,同时对测试区域的温度影响较小;随着电极间距的减小,电极片周围的场强梯度减小,但测试区域电场分布变化较小,探测点温度随着极片间距的减小而不断升高,但温度变化较小。

2) 插入式电极极片长度为 8 mm、宽度为 6 mm,极片间距为 4 mm 时标准偏差更小,所检测纳米颗粒 Zeta 电位的标准差为 0.98 mV。该研究为插入式电极优化设计提供一种新的思路。

参考文献(References):

- [1] ATTARD P. Recent advances in the electric double layer in colloid science[J]. Current Opinion in Colloid & Interface Science, 2001, 6(4): 366–371.
- [2] 吕思瑶, 朱登兆, 鲍云翔, 等. 大豆分离蛋白与染料木素共价交联对蛋白表征和结构的影响[J/OL]. 食品科学: 1–12[2021–12–15]. <https://kns.cnki.net.webvpn.wzu.edu.cn/kcms/detail/11.2206.TS.20211015.2005.002.html>.
- [3] 童志明, 李亚兵, 黄茗, 等. 井下作业返排残液对原油破乳脱水的影响及破乳剂筛选[J]. 化学与生物工程, 2021, 38(11): 43–49.
- [4] 王智巧, 马杰, 陈雅丽, 等. 不同环境条件下水铁矿和针铁矿纳米颗粒稳定性[J]. 环境科学, 2020, 41(5): 2292–2300.
- [5] 杨娟, 尚曙玉, 贾安, 等. 木犀草素固体脂质纳米粒的制备及其体内药动学研究[J]. 中成药, 2021, 43(9): 2281–2286.
- [6] 刘伟, 张珊珊, THOMAS J C, 等. 基于频谱细化算法的电泳光散射 Zeta 电位测量方法[J]. 光学学报, 2017, 37(2): 292–298.
- [7] 秦福元, 刘伟, 王文静, 等. Zeta 电位计算过程中 Henry 函数的优化表达式[J]. 光学学报, 2017, 37(10): 328–335.
- [8] MILLER J F, SCHATZEL K, VINCENT B. The determination of very small electrophoretic mobilities in polar and nonpolar colloidal dispersions using phase analysis light scattering[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1991, 143(2): 532–554.
- [9] 郝瑞锋, 邱健, 彭力, 等. 基于电泳光散射的纳米颗粒 Zeta 电位分析仪的研制[J]. 自动化与信息工程, 2018, 39(2): 1–7, 12.
- [10] 秦福元. 基于相位分析光散射的 Zeta 电位测量研究[D]. 淄博: 山东理工大学, 2018.
- [11] 韩国强. 电泳光散射 Zeta 电位检测系统研究及其关键模块设计[D]. 广州: 华南师范大学, 2014.
- [12] 吕永维. 电泳光散射法纳米颗粒 Zeta 电位测量方法研究[D]. 广州: 华南师范大学, 2015.
- [13] 吴恒. 纳米颗粒 Zeta 电位测量关键技术的研究[D]. 广州: 华南师范大学, 2016.
- [14] 黄桂琼, 邱健, 韩鹏, 等. U 型样品池中电场分布仿真及其对 Zeta 电位测量的影响[J]. 中国粉体技术, 2019, 25(4): 26–32.
- [15] 曹军, 洪芳军, 郑平. PDMS 微流控芯片中焦耳热效应的数值研究[J]. 工程热物理学报, 2009, 30(1): 124–128.
- [16] XUAN X C, SINTON D, LI D Q. Thermal end effects on electroosmotic flow in a capillary[J]. International Journal of Heat & Mass Transfer, 2004, 47(14/15/16): 3145–3157.

(责任编辑:赵 雁)