Доповіді
національної
академії наук
України

11 • 2008

ФІЗИКА

УДК 532.135:532.584

Є. Ю. Таран, В. О. Грязнова

Реологічне моделювання розведених суспензій деяких патогенів у градієнтних течіях

(Представлено академіком НАН України Л. А. Булавіним)

The structure-phenomenological theory of a stressed state in aqueous dilute suspensions of rod-like pathogenic microorganisms is presented. The obtained rheological equation is used to study the rheological behaviour of a dilute suspension of viruses in a simple shear flow. As a result, it is demonstrated that such a suspension behaves itself as an elastoviscous liquid medium manifesting both the pseudoplastic dependence of the effective viscosity of the suspension on the shear rate and the Weissenberg effect.

Моделювання переносу інфекцій у водяному середовищі неможливе без математичного моделювання динаміки зважених у ньому вірусів і патогенних бактерій під дією гідродинамічних сил, які виникають у градієнтних течіях водяного середовища. Успішність такого моделювання залежить значною мірою від точного знання геометричних параметрів патогенних мікроорганізмів, зважених у воді, а також від знання їх гідродинамічної взаємодії з водою, яка є їх носієм. Такі знання можна отримати реологічними методами, порівнюючи між собою значення ефективної в'язкості розведеної водяної суспензії патогенів, що одержуються експериментально за допомогою віскозиметрів, зі значеннями, які обчислюються за допомогою відповідної математичної моделі. Ця математична модель повинна визначати таку макрохарактеристику, як в'язкість розведеної водяної суспензії патогенів, через мікрохарактеристики зважених патогенних мікроорганізмів.

Реологічний метод вивчення патогенних мікроорганізмів було започатковано Янгом [1] при знаходженні геометричних параметрів віруса тютюнової мозаїки. Для моделювання паличкоподібних вірусів як частинок, зважених у воді, він використав недеформівний еліпсоїд обертання значного видовження. Математичною моделлю експерименту була залежність ефективної в'язкості розведеної суспензії еліпсоїдальних частинок у воді від швидкості зсуву у простій зсувній течії. Ця залежність встановлена теоретично у роботі Саіто [2] і обчислена Шерага [3].

Згідно з [4], ефективна в'язкість розведеної суспензії еліпсоїдальних частинок з низькомолекулярною несучою рідиною істотно залежить від геометрії течії суспензії. Тому результати Саіто [2] і Шерага [3] не можуть бути математичною моделлю реологічного вивчення водяних суспензій паличкоподібних патогенів при використанні віскозиметрів з різною геометрією течії в їх робочій зоні. Щоб уникнути цього недоліку, у даній роботі пропонується структурно-феноменологічна теорія напруженого стану у довільних градієнтних течіях розведених водяних суспензій таких патогенів. Ця теорія дозволяє визначати ефективну в'язкість розведених водяних суспензій паличкоподібних патогенних мікроорганізмів у довільних градієнтних течіях.

Загальна реологічна модель розведеної водяної суспензії паличкоподібних патогенних мікроорганізмів. Для реологічного вивчення патогенних мікроорганізмів їх поміщають у воду [1]. Суспензія, яка при цьому утворюється, повинна бути розведеною, щоб нехтувати можливою взаємодією між зваженими мікроорганізмами у градієнтних течіях такої суспензії.

Інформація про розміри патогенних паличкоподібних мікроорганізмів дозволяє припускати виконання подвійної нерівності $l \ll d \ll \bar{l}$ для їх водяної суспензії. Тут d — характерний розмір зважених мікроорганізмів; l — характерний розмір молекул води; $\bar{l}$ — характерний розмір робочої зони віскозиметра. Ця подвійна нерівність дозволяє вивчати розведену суспензію патогенних мікроорганізмів у воді на двох масштабних рівнях, а саме, на мікромасштабному рівні зважених мікроорганізмів і на макромасштабному рівні характерного розміру області течії суспензії, комбінуючи одержані результати у структурно-феноменологічну теорію [4].

На мікромасштабному рівні зважених патогенних мікроорганізмів нерівність $l \ll d$ дозволяє розглядати як гідродинамічну взаємодію води зі зваженими мікроорганізмами і вивчати цю взаємодію в рамках динамічного метода Ландау [5], використовуючи, як і в [1], видовжений еліпсоїд обертання для гідродинамічного моделювання зважених мікроорганізмів. Застосування метода Ландау [5] на цьому етапі дослідження дозволяє знайти компоненти тензора напружень σ_{ij} у розведеній суспензії паличкоподібних патогенних мікроорганізмів

$$
\begin{aligned}
&\sigma_{11} = -p + \left(2\mu + \frac{4\mu V}{3ab^2\beta_0''}\right)d_{11},\\
&\sigma_{22} = -p + \left(2\mu + \frac{2\mu V}{ab^4\alpha_0'}\right)d_{22} + \frac{2\mu V(\beta_0'' - \alpha_0'')}{3ab^4\beta_0''\alpha_0'},\\
&\sigma_{33} = -p + \left(2\mu + \frac{2\mu V}{ab^4\alpha_0'}\right)d_{33} + \frac{2\mu V(\beta_0'' - \alpha_0'')}{3ab^4\beta_0''\alpha_0'},\\
&\sigma_{12} = \left(2\mu + \frac{4\mu\alpha_0 V}{ab^2\beta_0' B}\right)d_{12} + \frac{4\mu V b^2(\omega_{12} + \omega_3)}{ab^2 B},\\
&\sigma_{21} = \left(2\mu + \frac{4\mu\beta_0 V}{ab^2\beta_0' B}\right)d_{21} + \frac{4\mu V a^2(\omega_{21} - \omega_3)}{ab^2 B},\\
&\sigma_{13} = \left(2\mu + \frac{4\mu\alpha_0 V}{ab^2\beta_0' B}\right)d_{13} + \frac{4\mu V b^2(\omega_{13} - \omega_2)}{ab^2 B},\\
&\sigma_{31} = \left(2\mu + \frac{4\mu\beta_0 V}{ab^2\beta_0' B}\right)d_{31} + \frac{4\mu V a^2(\omega_{31} + \omega_2)}{ab^2 B},\\
&\sigma_{23} = \left(2\mu + \frac{2\mu V}{ab^4\alpha_0'}\right)d_{23}, \qquad \sigma_{32} = \left(2\mu + \frac{2\mu V}{ab^4\alpha_0'}\right)d_{32}
\end{aligned}
\tag{1}
$$

у рухомій системі координат $Ox_1x_2x_3$, осі якої збігаються з осями еліпсоїда обертання, що моделює зважені мікроорганізми. У формулах (1) p — тиск; μ — в'язкість води; a і b — півосі еліпсоїда обертання ($a > b$), який моделює зважені мікроорганізми; V — об'ємна концентрація патогенних мікрооорганізмів у суспензії; d_{ij} — компоненти тензора швидкостей деформації; ω_{il} — компоненти тензора вихору швидкості; ω_2, ω_3 — компоненти кутової швидкості еліпсоїда, який моделює зважені мікрооорганізми; $B = a^2\alpha_0 + b^2\beta_0$; α_0, β_0, α_0', β_0', α_0'', β_0'' — функції, які визначені Джеффрі у [6] і обчислені нижче:

$$
\begin{gathered}
ab^2\alpha_0 = 2 - 2A, \qquad ab^2\beta_0 = A, \qquad ab^4\alpha_0' = \frac{2p_0 - 3A}{4(p_0^2 - 1)}, \\
ab^4\beta_0' = \frac{3A - 2}{p_0^2 - 1}, \qquad ab^2\alpha_0'' = \frac{(4p_0^2 - 1)A - 2p_0^2}{4(p_0^2 - 1)}, \qquad ab^2\beta_0'' = \frac{2p_0^2 - (2p_0^2 + 1)A}{p_0^2 - 1},
\end{gathered}
\tag{2}
$$

де

$$
p_0 = \frac{a}{b} \qquad \text{і} \qquad A = \frac{p_0^2}{p_0^2 - 1} - \frac{p_0 \ln(p_0 + \sqrt{p_0^2 - 1})}{(p_0^2 - 1)^{3/2}} \qquad \text{для} \qquad p_0 > 1.
$$

Аналіз отриманих результатів показує, що для довільних градієнтних течій розведеної суспензії патогенних мікрооорганізмів перехід від рухомої системи координат $Ox_1x_2x_3$ до лабораторної у виразах (1), які визначають напруження у суспензії, є неможливим. Тому для знаходження тензора напружень, який можна використовувати для вивчення напруженого стану у довільних градієнтних течіях розведеної суспензії патогенних мікроорганізмів, ми комбінуємо результати проведеного мікромасштабного вивчення суспензії з результатами структурно-континуального вивчення цієї суспензії на макромасштабному рівні характерного розміру області течії суспензії.

На макромасштабному рівні нерівність $d \ll \bar{l}$ дозволяє моделювати суспензію, що розглядається, структурним континуумом з внутрішніми мікропараметрами n_i і N_i, які характеризують, відповідно, орієнтацію зважених патогенних мікроорганізмів та їх кутову швидкість відносно несучої рідини суспензії. Тут $N_i = \dot{n}_i - \omega_{ik}n_k$; крапка над n_i позначає частинне диференціювання за часом t. Такий вибір внутрішніх мікропараметрів структурного континууму зумовлений результатами мікромасштабного вивчення суспензії.

У рамках структурно-континуального вивчення суспензії [4] визначальне рівняння для напруження T_{ij}, яке виникає у довільних градієнтних течіях розведеної суспензії модельних частинок, постулюється феноменологічно, як функція тензора швидкостей деформації d_{ij} і внутрішніх мікропараметрів n_i і N_i структурного континууму, що моделює реальну суспензію патогенних мікроорганізмів. Згідно з [4], найбільш загальне феноменологічне визначальне рівняння для напруження у суспензії, що розглядається, має вигляд

$$
\begin{aligned}
T_{ij} = {} & (a_0 + a_1 d_{km}\langle n_k n_m\rangle)\delta_{ij} + a_2\langle n_i n_j\rangle + a_3 d_{km}\langle n_k n_m n_i n_j\rangle + a_4 d_{ij} + \\
& + a_5 d_{ik}\langle n_k n_j\rangle + a_6 d_{jk}\langle n_k n_i\rangle + a_7\langle n_i N_j\rangle + a_8\langle n_j N_i\rangle,
\end{aligned}
\tag{3}
$$

де a_i ($i = \overline{0,8}$) — феноменологічні сталі. Кутові дужки $\langle\rangle$ у (3) означають осереднення у фазовому просторі координат вектора орієнтації n_i зважених еліпсоїдальних частинок за допомогою функції розподілу F кутових положень вектора n_i, яка задовольняє рівняння

$$
\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial n_i}(F\dot{n}_i) = 0. \tag{4}
$$

Щоб знайти теоретично феноменологічні сталі a_i ($i = \overline{0,8}$) визначального рівняння (3), переходимо у цьому рівнянні до рухомої системи координат $Ox_1x_2x_3$, що зв'язана зі зваженим модельним еліпсоїдом, і порівнюємо компоненти тензорів T_{ij} і σ_{ij}. Із такого порівняння випливає:

$$
\begin{aligned}
&a_0 = -p, \qquad a_1 = \frac{2\mu V(\beta_0'' - \alpha_0'')}{3ab^4\beta_0''\alpha_0'}, \qquad a_2 = 0,\\
&a_3 = \frac{2\mu V}{ab^2}\left[\frac{\alpha_0'' + \beta_0''}{b^2\beta_0''\alpha_0'} - \frac{2(\alpha_0 + \beta_0)}{\beta_0'(a^2\alpha_0 + b^2\beta_0)}\right], \qquad a_4 = 2\mu\left(1 + \frac{V}{ab^4\alpha_0'}\right),\\
&a_5 = \frac{4\mu V}{ab^2}\left(\frac{\beta_0}{\beta_0'(a^2\alpha_0 + b^2\beta_0)} - \frac{1}{2b^2\alpha_0'}\right), \qquad a_6 = \frac{4\mu V}{ab^2}\left(\frac{\alpha_0}{\beta_0'(a^2\alpha_0 + b^2\beta_0)} - \frac{1}{2b^2\alpha_0'}\right),\\
&a_7 = \frac{4b^2\mu V}{ab^2(a^2\alpha_0 + b^2\beta_0)}, \qquad a_8 = -\frac{4a^2\mu V}{ab^2(a^2\alpha_0 + b^2\beta_0)}.
\end{aligned}
\tag{5}
$$

Згідно з (5) і (2), коефіцієнти a_i ($i = \overline{0,8}$) визначального рівняння (3) для напруження T_{ij} у довільних градієнтних течіях розведеної суспензії паличкоподібних патогенів залежать лише від коефіцієнта μ динамічної в'язкості води як несучої рідини суспензії, об'ємної концентрації V зважених мікроорганізмів, а також від осьового відношення p_0 еліпсоїда обертання, який моделює зважені паличкоподібні патогенні мікроорганізми.

Відзначимо, що рівняння (3) з коефіцієнтами, які визначаються співвідношеннями (5) і (2), є загальним визначальним рівнянням для напруження у довільних градієнтних течіях розведеної суспензії еліпсоїдальних модельних частинок, зважених у воді, оскільки воно отримано до вивчення обертальної динаміки зважених частинок суспензії в її градієнтних течіях.

Реологічне моделювання розведеної водяної суспензії вірусів. Застосуємо рівняння (3), (4) разом із співвідношеннями (5) і (2) для реологічного вивчення розведеної водяної суспензії вірусу тютюнової мозаїки, властивості якої у течії простого зсуву відомі з роботи [1]. Для такого застосування рівнянь (3) і (4) їх слід доповнити визначальним рівнянням для внутрішніх мікропараметрів n_i і N_i структурного континууму, який моделює розведену суспензію вірусів.

Згідно з [1], розміри вірусу тютюнової мозаїки є такими, що його обертальна динаміка у градієнтних течіях води, як несучої рідини суспензії, визначається не тільки гідродинамічними силами, а й ефективними силами обертальної броунівської дифузії. Це означає, що ефективний радіус $r = \sqrt[3]{ab^2}$ еліпсоїда обертання, який моделює вірус тютюнової мозаїки, задовольняє умову 10^{-8} м $< r < 10^{-6}$ м, встановлену Петерліном [7]. Визначальне рівняння для внутрішніх мікропараметрів n_i і N_i структурного континууму, який моделює розведену суспензію таких модельних еліпсоїдальних частинок, встановлено у [4]

$$
N_i - \lambda(d_{ik}n_k - d_{km}n_kn_mn_i) - D_r\left(n_in_k\frac{\partial \ln F}{\partial n_k} - \frac{\partial \ln F}{\partial n_i}\right) = 0. \tag{6}
$$

Тут $\lambda = (p_0^2 - 1)/(p_0^2 + 1)$; D_r — коефіцієнт обертальної броунівської дифузії у воді зважених вірусів, що моделюються еліпсоїдом обертання, $D_r = kT/W$, де k — стала Больцмана;

T — абсолютна температура; W — коефіцієнт обертального тертя модельної еліпсоїдальної частинки у воді,

$$W = 4\nu\mu\frac{p_0^4 - 1}{p_0^2}\left[\frac{2p_0^2 - 1}{2p_0^2\sqrt{p_0^2 - 1}}\ln\frac{p_0 + \sqrt{p_0^2 - 1}}{p_0 - \sqrt{p_0^2 - 1}} - 1\right]^{-1},$$

якщо $p_0 > 1$; тут $\nu = 4\pi ab^2/3$.

Використання у рівняннях (3) і (4) виразів для N_i і $\dot{n}_i$, що отримуються з (6), дозволяє знайти реологічне рівняння розведеної суспензії вірусів у воді

$$T_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu\left(1 + \frac{V}{ab^4\alpha_0'}\right)d_{ij} + 12\mu D_r\frac{V}{ab^2}\frac{a^2 - b^2}{a^2\alpha_0 + b^2\beta_0}\left(\langle n_i n_j\rangle - \frac{1}{3}\delta_{ij}\right) + \\ + 2\mu\frac{V}{ab^2}\left[\frac{\alpha_0''}{b^2\alpha_0'\beta_0''} + \frac{1}{b^2\alpha_0'} - \frac{4}{\beta_0'(a^2 + b^2)}\right]d_{km}\langle n_k n_m n_i n_j\rangle + \\ + 2\mu\frac{V}{ab^2}\left[\frac{2}{\beta_0'(a^2 + b^2)} - \frac{1}{b^2\alpha_0'}\right](d_{jk}\langle n_k n_i\rangle + d_{ik}\langle n_k n_j\rangle) \tag{7}$$

і рівняння

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial n_i}((\omega_{ik}n_k + \lambda(d_{ik}n_k - d_{km}n_k n_m n_i))F) = \\ = D_r\left(\Delta F - 2n_k\frac{\partial F}{\partial n_k} + n_k n_m\frac{\partial^2 F}{\partial n_k \partial n_m}\right) \tag{8}$$

для функції розподілу F, яка використовується для осереднення у (7).

Рівняння (7) збігається з реологічним рівнянням розведеної суспензії броунівських еліпсоїдів обертання з ньютонівською несучою рідиною, яке було одержано у [4] іншим способом з використанням енергетичного методу Ейнштейна [8] при вивченні гідродинамічної взаємодії зважених частинок з несучою рідиною. У роботі [4] показано, що ефективна в'язкість розведеної суспензії броунівських еліпсоїдальних частинок, які у даній роботі моделюють зважені віруси, істотно залежить від геометрії течії. Тензорна форма реологічного рівняння (7) дозволяє знаходити ефективну в'язкість розведеної суспензії вірусів для течій будь-якої геометрії за формулою [4]

$$\mu_a = \frac{T_{ij}d_{ij}}{2d_{km}d_{km}}. \tag{9}$$

Знаходження за допомогою визначальних рівнянь (7)–(9) аналітичних виразів і числових значень (рис. 1, 2) для ефективної в'язкості μ_a розведеної суспензії вірусів у простій зсувній течії $v_x = 0$, $v_y = Kx$, $v_z = 0$ ($K = \text{const}$) та ненульових різниць нормальних напружень $\sigma_1 = T_{yy} - T_{zz}$, $\sigma_2 = T_{xx} - T_{zz}$, які виникають у цій течії, показує, що розведена суспензія вірусів поводить себе як пружнов'язке рідке середовище. Залежність μ_a від K (див. рис. 1) є характерною для псевдопластичних рідин. Ненульові значення σ_1 і σ_2 (див. рис. 2) є проявом пружних властивостей суспензії. Вираз для μ_a, знайдений у даній роботі, тотожно збігається з відповідним виразом для розведеної суспензії броунівських еліпсоїдальних частинок, отриманим Саіто [2] іншим шляхом, а числові значення μ_a (див. рис. 1) збігаються

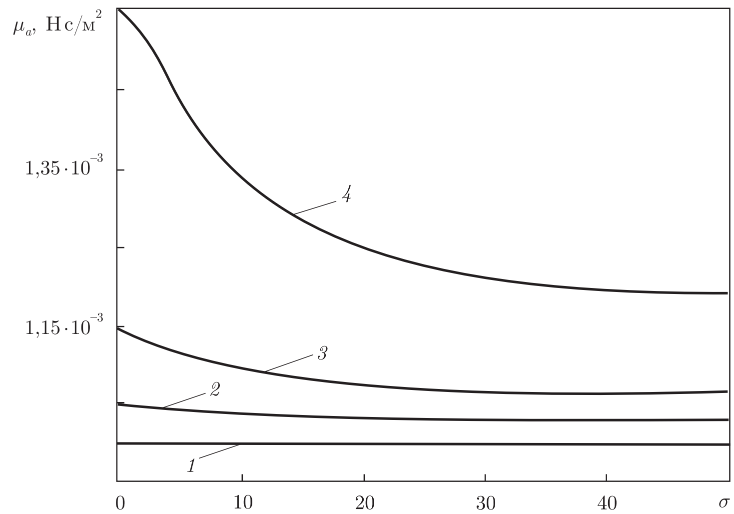

Рис. 1. Залежність ефективної в'язкості μ_a від $\sigma = K/D_r$ для розведеної суспензії ($V = 0{,}01$) у воді ($\mu = 0{,}001$ Нс/м^2) еліпсоїдальних модельних частинок з ефективним радіусом $r = 10^{-7}$ м; криві *2–4* відповідають значенням $p_0 = 4, 10, 25$; крива *1* відповідає в'язкості несучої рідини суспензії за відсутності зважених вірусів

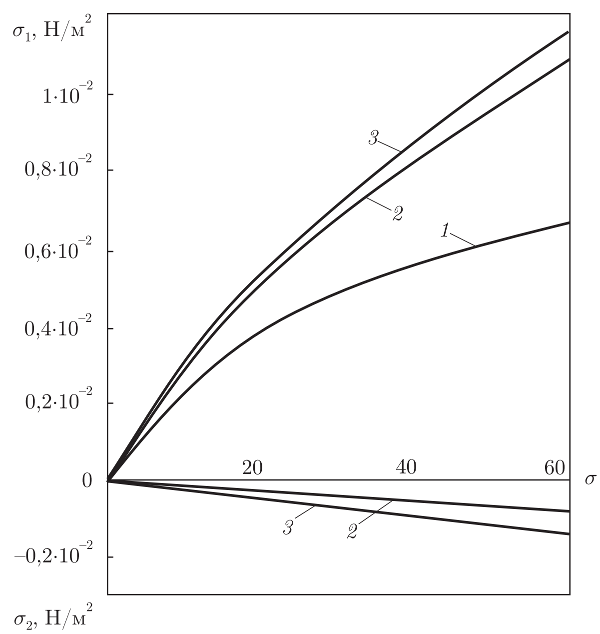

Рис. 2. Залежність різниць нормальних напружень $\sigma_1 = T_{yy} - T_{zz}$ і $\sigma_2 = T_{xx} - T_{zz}$ від $\sigma = K/D_r$ для розведеної суспензії ($V = 0{,}01$) у воді ($\mu = 0{,}001$ Нс/м^2) еліпсоїдальних модельних частинок з ефективним радіусом $r = 10^{-7}$ м при температурі $T = 300$ K; криві *1–3* відповідають значенням $p_0 = 4, 10, 25$

з відповідними значеннями, які обчислив Шерага [3], користуючись аналітичними результатами Саіто [2]. Янг [1] експериментально підтвердив результати Саіто–Шерага [2, 3], використовуючи їх при віскозиметричному знаходженні довжини паличкоподібного вірусу тютюнової мозаїки.

Порівняння з результатами, отриманими раніше, підтверджують статус рівняння (3) як загального реологічного рівняння розведеної суспензії паличкоподібних патогенних мікроорганізмів. Ці порівняння підтверджують також статус рівняння (7) як визначального рівняння напруженого стану у довільних градієнтних течіях розведеної суспензії вірусів у воді. Отже, рівняння (7)–(9) можуть бути математичною моделлю реологічного вивчення вірусів замість моделі Саіто–Шерага [2, 3] при використанні віскозиметрів з різною геометрією течії у їх робочій зоні.

1. *Yang J. T.* Non-Newtonian viscosity and flow birefrigence in dilute suspension of rigid particles: tobacco mosaic virus // J. Amer. Chem. Soc. – 1961. – **83**. – P. 1316–1324.
2. *Saito N.* The effect of the Brownian motion on the viscosity of solution of macromolecules. I. Ellipsoid of revolution // J. Phys. Soc. Japan. – 1951. – **6**. – P. 296–302.
3. *Sheraga H. A.* Non-Newtonian viscosity of solutions of ellipsoidal particle // J. Chem. Phys. – 1951. – **23**. – P. 1526–1532.
4. *Таран Е. Ю.* Структурно-феноменологическая реология разбавленных суспензий: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.02.05. – Харьков, 1994. – 346 с.
5. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Механика сплошных сред. – Москва: Гостехиздат, 1954. – 795 с.
6. *Jeffery G. B.* The motion of ellipsoidal particles immersed in a viscous fluid // Proc. Roy. Soc. – 1922. – **A102**. – P. 161–169.
7. *Peterlin* A. Über die Viskosität von verdünnten Lösungen und Suspensionen in Abhängigkeit von der Teilchenform // Z. Physik. – 1938. – **19**. – S. 289–306.
8. *Einstein A.* Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen // Ann. Physik. – 1906. – **19**. – S. 289–306.

Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 02.04.2008

УДК 537.533

В. А. Тутык

Исследование явления запаздывания зажигания высоковольтного тлеющего разряда для повышения рабочего давления газоразрядных электронных пушек

(Представлено академиком НАН Украины М. И. Гасиком)

The results of studies of the time of retardation t_{r} of the ignition of a high-voltage glow discharge on the operation of low-vacuum gas-discharge electronic guns (LGEG) with a hollow anode in the pulse mode are given. It is shown that the time t_{r} consists of the statistical time of retardation t_{s} and the time of formation t_{f}. Dependences of the time t_{r} on various parameters are found. The method of using the time of retardation to increase the working pressure of LGEG by a diminution of the steepness of their volt-ampere characteristics $S = \Delta I/\Delta U$ is offered and experimentally confirmed at the high-voltage pulse length $t_{\mathrm{p}} < t_{\mathrm{r}}$.

Электронные пушки эффективно преобразовывают электрическую энергию в другие виды энергии: тепловую, радиационную и микроволновую, позволяя получать на поверхности материалов высокие удельные мощности 10^8–10^{11} Вт/м^2 [1, 2]. Эти свойства электронных пушек открыли возможность использования их в различных электронно-лучевых технологиях (ЭЛТ) в высоком вакууме для решения многих технических задач [1–5]. В последнее