第三章 模擬方法

本研究的目的在考慮具有布朗運動及擴散泳行為的膠體粒子在楔型管中的輸送與吸附行為。我們將改變楔行管長、粒徑大小、流速大小及電雙層參數 N_{DL}，利用軌跡分析理論來探討膠體粒子於此收集器中吸附效率的變化情形，再利用各種力的大小值去分析吸附效率的結果。

3-1 程序模擬

在傳統分析膠體粒子吸附現象時，大都以對流擴散方程式(convective-diffusion)來描述。而此方程式是建立在 Eulerian 座標系統上，並無法解釋膠體粒子的隨機布朗運動行為。本論文涵蓋布朗運動吸附軌跡行為，使用了加上膠體粒子布朗運動的 Langevin 方程式來描述膠體粒子在流場中吸附的過程。我們使用作用於膠體粒子上的力平衡關係來建立膠體粒子的吸附軌跡方程式

我們將本研究中所使用的基本概念與方法繪製成流程圖，如圖(3-1)所示。

3-2 Langevin 方程式

Langevin 方程式(Ramarao et al., 1994[24]; Chang & Whang, 1997[25]，1998[26])表示如下：

$$m_p \frac{dV}{dt} = F_d + F_e + F_r \tag{3.1}$$

其中

$$m_p = \frac{4}{3} p r_p^3 r_p \tag{3.2a}$$

$$F_d = m_p b^{'} (U - V) \tag{3.2b}$$

$$F_r = m_p A(t) \tag{3.2c}$$

$$F_e = F_{LO} + F_{DL} \tag{3.2d}$$

$$b^{'} = \frac{6p\, r_p m}{C_s m_p} \tag{3.2e}$$

在(3.1)至$(3.2e)$式中，m_p為膠體粒子的質量；V為膠體粒子的速度；t為時間；F_d為流體拖曳力；F_e為外力；F_r為隨機碰撞力；$b^{'}$為摩擦係數；$A(t)$為隨機布朗加速度；m為流體黏度；C_s為 Cunningham 修正因子。

一般討論的外力 (Fe) 包含了重力、浮力、膠體粒子與收集器之間的 DLVO 內部作用力，但是本論文討論的粒子非常的微小，而且假設與流體的密度又十分相近，所以重力與浮力可以忽略，只考慮當膠體粒子與收集器相當接近時，其 DLVO 內部作用力的影響。

3-3 吸附軌跡分析

為了要求得收集器之收集效率，我們需要知道膠體粒子的吸附運動軌跡為何。將$(3.2b)$式、$(3.2c)$式與$(3.2d)$式代入(3.1)式可得

$$\frac{dV}{dt}=b^{'}(U-V)+\frac{F_{LO}+F_{DL}}{m_p}+A(t) \tag{3.3}$$

在此假設流體的流速為一定值，所以(3.3)式可以改寫為

$$\frac{dV}{dt}+b^{'}V=b^{'}U+\frac{F_{LO}+F_{DL}}{m_p}+A(t) \tag{3.4}$$

積分(3.4)得：

$$\begin{aligned} V&=e^{-b^{'}t}\int\left[b^{'}U+A(t)+\frac{F_{LO}}{m_P}+\frac{F_{DL}}{m_P}\right]e^{b^{'}t}dt+Ce^{-b^{'}t} \\ &=U+R_V(t)+\frac{F_{LO}}{b^{'}m_P}+\frac{F_{DL}}{b^{'}m_P}+Ce^{-b^{'}t} \end{aligned} \tag{3.5}$$

在上式中，積分後的布朗運動加速度 $R_V(t)$定義為：

$$R_V(t)=\int_0^t \exp\left[b^{'}(z-t)\right]A(z)\,dz \tag{3.6}$$

代入初始定義條件如下

當$t=0$時 ，$\begin{cases} V=V_0 \\ R_V(t)=0 \end{cases}$

可得：

$$C=V_0-U-\frac{1}{b^{'}}\left(\frac{F_{LO}}{m_P}+\frac{F_{DL}}{m_P}\right) \tag{3.7}$$

將(3.7)代入(3.5)則為：

$$
\begin{aligned}
V &= U + R_V(t) + \frac{F_{LO}}{b^{'} m_P} + \frac{F_{DL}}{b^{'} m_P} + Ce^{-b^{'}t} \\
&= U + R_V(t) + \frac{F_{LO}}{b^{'} m_P} + \frac{F_{DL}}{b^{'} m_P}\left[V_0 - U - \frac{1}{b^{'}}\left(\frac{F_{LO}}{m_P} + \frac{F_{DL}}{m_P}\right)\right]e^{-b^{'}t} \\
&= V_0 \exp\left(-b^{'}t\right) + U\left[1 - \exp\left(-b^{'}t\right)\right] + R_V(t) + \frac{1}{b^{'}}\left(\frac{F_{LO}+F_{DL}}{m_p}\right)\left[1-\exp\left(-b^{'}t\right)\right]
\end{aligned}
\tag{3.8}
$$

此外，由膠體粒子在流場中的速度可以推導出膠體粒子在流場中的位移。利用下列式子。

$$
V = \frac{dS}{dt}
$$

積分後，(3.8)式變成為：

$$
\begin{aligned}
S &= U_t + \frac{U}{b^{'}}e^{-bt} - \frac{V_0}{b^{'}}e^{-b^{'}t} + R_r(t) \\
&+ \left(\frac{F_{LO}+F_{DL}}{b^{'} m_p}\right)t + \left(\frac{F_{LO}+F_{DL}}{b^{'2} m_p}\right)e^{-b^{'}t} + C_1
\end{aligned}
\tag{3.9}
$$

在上式中，我們定義布朗運動位移為

$$
R_r(t) = \int_0^t \left[\int_0^t \exp\left(b^{'}z\right) A(z)\, dz\right] \exp\left(-b^{'}n\right) dn \tag{3.10}
$$

加上初始條件

當$t=0$**時** $\begin{cases} S = S_0 \\ R_r(t) = 0 \end{cases}$

可得：

$$
C_1 = r_0 - \frac{U}{b^{'}} + \frac{V_0}{b^{'}} - \left(\frac{F_{LO}+F_{DL}}{b^{'2} m_p}\right) \tag{3.11}
$$

可以積分求得膠體的位移向量為

$$
\begin{aligned}
S = S_0 + \frac{V_0}{b^{'}}\left[1-\exp\left(-b^{'}t\right)\right] + U\left\{t-\frac{1}{b^{'}}\left[1-\exp\left(-b^{'}t\right)\right]\right\} + R_r(t) \\
+\left(\frac{F_{LO}+F_{DL}}{b^{'}m_p}\right)\left[t+\frac{\exp\left(-b^{'}t\right)}{b^{'}}-\frac{1}{b^{'}}\right]
\end{aligned}
\qquad (3.11)
$$

另外，$R_V(t)$及$R_r(t)$是雙變數 Guassian 分佈的隨機變量，此兩個變量可描述如下:

$$
\begin{bmatrix} R_{Vi} \\ R_{ri} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{Vi} & 0 \\ s_{Vri}/s_{Vi} & \left(s_{ri}^{2}-s_{Vri}^{2}/s_{Vi}^{2}\right)^{1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_i \\ m_i \end{bmatrix} \qquad (3.12)
$$

其中:

$$
s_{Vi}^{2} = \frac{\bar{q}}{b^{'}}\left[1-\exp\left(-2b^{'}\Delta t\right)\right] \qquad (3.13a)
$$

$$
s_{ri}^{2} = \frac{\bar{q}}{b^{'3}}\left[2b^{'}\Delta t-3+4\exp\left(-b^{'}\Delta t\right)-\exp\left(-2b^{'}\Delta t\right)\right] \qquad (3.13b)
$$

$$
s_{Vri}^{2} = \frac{\bar{q}}{b^{'2}}\left[1-\exp\left(-b^{'}\Delta t\right)\right]^{2} \qquad (3.13c)
$$

$$
\bar{q} = \frac{b^{'}k_B T}{m_p} \qquad (3.13d)
$$

另外，n_i與m_i為常態分佈數(normal distributed number)，若我們取N_i與M_i為$[0,1]$間的隨機亂數，則n_i與m_i可以表示如下

$$
A_i = \frac{1}{\sqrt{2p}}\int_{-\infty}^{a_i}\exp\left(-z^{2}/2\right)dz \qquad (3.13)
$$

其中$A_i = N_i$或M_i，而$a_i = n_i$或m_i。

計算布朗粒子的初始速度時，我們假設膠體粒子本身初始在流體的熱力學平衡下，膠體粒子的速度與流體相同，並且考慮膠體布朗運

動的行為，因此我們可以運用 Maxwellian 分佈來描述膠體的初始速度(Chandrasekhar，1943)

$$V_0 = U_0 + V_0^{'} \tag{3.15}$$

其中

U_0 為 $S = S_0$ 時的流體速度

$V_0^{'}$ 為 Gaussian 隨機變數，可以表示如下

$$\left\langle V_0^{'} \right\rangle = 0 \tag{3.16a}$$

$$\left\langle V_0^{'} V_0^{'} \right\rangle = \frac{3b^{'} k_B T}{m_p} \tag{3.16b}$$

另外，當考慮到前一章所提及的球型膠體粒子垂直於收集器表面之擴散泳運動現象與減速效應時，可以將(3.8)式及(3.11)式分別改寫為

$$V_{\perp} = \left\{ V_0 \exp\left(-b^{'} t\right) + U\left[1 - \exp\left(-b^{'} t\right)\right] \right\} F_1(H) F_2(H) F_3(H) + \left\{ R_V(t) + \frac{1}{b^{'}} \left(\frac{F_{LO} + F_{DL}}{m_p} \right) \left[1 - \exp\left(-b^{'} t\right)\right] \right\} F_1(H) F_3(H) + \left(\frac{k_B T}{h} L^* K \nabla C_{\infty} \right) F_1(l) \tag{3.17}$$

$$S_{\perp} = S_0 + \left\{ \frac{V_0}{b^{'}} \left[1 - \exp\left(-b^{'} t\right)\right] + U\left[t - \frac{1}{b^{'}} \left(1 - \exp\left(-b^{'} t\right)\right) \right] \right\} F_1(H) F_2(H) F_3(H) + \left\{ R_r(t) + \left(\frac{F_{LO} + F_{DL}}{b^{'} m_p} \right) \left[t + \frac{\exp\left(-b^{'} t\right)}{b^{'}} - \frac{1}{b^{'}} \right] \right\} F_1(H) F_3(H) + \left(\frac{k_B T}{m} L^* K \nabla C_{\infty} \right) F_1(l) t \tag{3.18}$$

而考慮球型膠體粒子平行於收集器表面之擴散泳運動現象與減速效

應時，可以將(3.8)**式及**(3.11)**式分別改寫為**

$$V_{//} = \left\{ V_0 \exp\left(-b^{'}t\right) + U\left[1-\exp\left(-b^{'}t\right)\right] \right\} F_1(H)\, F_2(H)\, F_3(H)$$
$$+ \left\{ R_V(t) + \frac{1}{b^{'}}\left(\frac{F_{LO}+F_{DL}}{m_p}\right)\left[1-\exp\left(-b^{'}t\right)\right] \right\} F_1(H)\, F_3(H) + \left(\frac{k_B T}{m} L^{*} K \nabla C_{\infty}\right) F_2(l)$$

(3.19)

$$S_{//} = S_0 + \left\{ \frac{V_0}{b^{'}}\left[1-\exp\left(-b^{'}t\right)\right] + U\left[t - \frac{1}{b^{'}}\left(1-\exp\left(-b^{'}t\right)\right)\right] \right\} F_1(H)\, F_2(H)\, F_3(H)$$
$$+ \left\{ R_r(t) + \left(\frac{F_{LO}+F_{DL}}{b^{'} m_p}\right)\left[t + \frac{\exp\left(-b^{'}t\right)}{b^{'}} - \frac{1}{b^{'}}\right] \right\} F_1(H)\, F_3(H) + \left(\frac{k_B T}{m} L^{*} K \nabla C_{\infty}\right) F_2(l)\, t$$

(3.20)

3-4 吸附效率(Efficiency)的定義

一般而言，所謂總收集效率 E(overall collection effficient)的定義為膠體粒子流入過濾床到流出過濾床的濃度差比值

$$E = \frac{C_{in} - C_{out}}{C_{in}} \qquad (3.21)$$

其中，E:總收集效率(overall collection efficiency)

C_{in}:流入過濾器的膠體粒子濃度或數目

C_{out}:流出過濾器的膠體粒子濃度或數目

過濾床的本身可以視為由許多過濾收集器的小單元組合而成，每個小單元的收集效率，也就是單元收集效率(unit collection efficiency)，其定義如下:

$$e = \frac{c_{in} - c_{out}}{c_{in}} \qquad (3.22)$$

其中，

e:第 i 個單位的收集效率

c_{in}:由第 i-1 個單位收集器所流入的膠體粒子濃度或數目

C_{out}:由第 i 個單位收集器所流出的膠體粒子濃度或數目

假設每個單位收集器內只含有一個收集器，其收集效率稱為單一收集效率(single collector efficiency)

$$h_s = \frac{Y_0}{r_f} P_p \qquad (3.23)$$

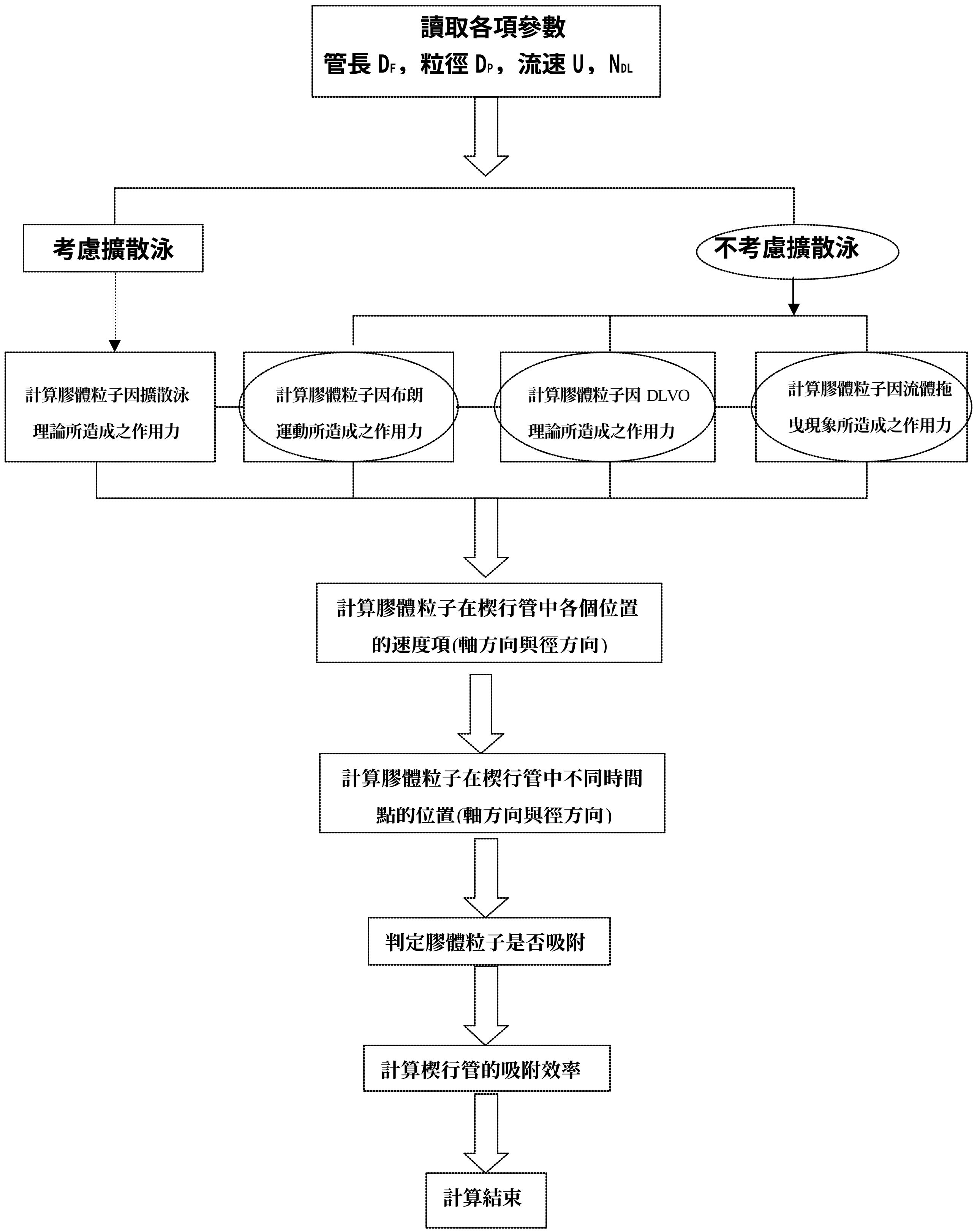
$$P_p = \frac{I_{dep}}{N_{gen}} \tag{3.24}$$

其中 ， Y_0 **為楔型管入口處控制窗的大小**

r_f **為收集器的半徑**

I_{dep} **為楔型管中吸附的膠體粒子顆數**

N_{gen} **為進入楔型管中總體的膠體粒子個數**


讀取各項參數
管長 D_F，粒徑 D_P，流速 U，N_{DL}
考慮擴散泳
不考慮擴散泳
計算膠體粒子因擴散泳理論所造成之作用力
計算膠體粒子因布朗運動所造成之作用力
計算膠體粒子因 DLVO 理論所造成之作用力
計算膠體粒子因流體拖曳現象所造成之作用力
計算膠體粒子在楔行管中各個位置的速度項(軸方向與徑方向)
計算膠體粒子在楔行管中不同時間點的位置(軸方向與徑方向)
判定膠體粒子是否吸附
計算楔行管的吸附效率
計算結束

圖(3-1)　模擬方法流程圖。