

第二章 文獻回顧

對氣懸膠在不同吸附條件下做吸附效率的比較，一直是熱門探討的題目，Yongwon Jung & Chi Tien^[1] 在 1993 年就曾發表一篇探討氣懸膠吸附效率的論文，其中提出了在不同條件下膠體粒子的吸附效率經驗式，如下：

$$h_0 = 0.2589 N_{St_{eff}}^{1.3437} N_R^{0.23} \quad \text{當 } N_{St} < 1.2 \text{ 時} \quad (2-1)$$

$$h_0 = 0.2589 N_{St_{eff}}^{1.3437} N_R^{0.73} g \quad \text{當 } N_{St} > 1.2 \text{ 時} \quad (2-2)$$

其中

$$g = 1.4315 N_{St_{eff}}^{-1.968}$$

$$N_R = \frac{d_p}{d_g}$$

$$N_{St_{eff}} = \left[A(a_1) + 1.14 N_{Re}^{\frac{1}{2}} (1 - a_1)^{-\frac{3}{2}} \right] \left[\frac{N_{St}}{2} \right]$$

$$N_{Re} = \frac{d_p \mathbf{r}_f u_s}{\mathbf{m}}$$

$$N_{St} = \frac{\mathbf{r}_p d_p^2 u_s c_s}{9 \mathbf{m} d_g}$$

$$A(a_1) = \frac{\left(6 - 6a_1^{\frac{5}{3}} \right)}{\left(6 - 9a_1^{\frac{1}{3}} + 9a_1^{\frac{5}{3}} - 6a_1^2 \right)}$$

$$a_1 = 1 - e$$

相以實驗數據佐證時，極其吻合，但此公式卻無法表現膠體粒子在粒徑及流速皆小時的布朗運動作用情形。在膠體粒子粒徑小於 1 mm 時，必須多加布朗運動作用力才能準確的描述，此經驗式之討論及修正將在第四章中做更詳盡的比較與描述。

本論文在描述膠體粒子通過楔型管時，要瞭解膠體粒子的吸附情形，有兩項要素必須要分別討論：(1) 楔型管收集器的流場分佈 (2) 膠體粒子的軌跡方程式，首先先來描述流場分佈：

2-1 楔型管收集器的流場分佈

本論文中所使用的楔型管為 PCT (parabolic constricted tube) (Payatakes et al, 1973^[2,3]; Neira & Payatakes, 1978^[4])，此楔型管的幾何形狀可用下列方程式描述：

$$\text{PCT:} \quad r_w = r_c + 4(r_{\max} - r_c) \left(0.5 - \frac{z}{l_f} \right)^2 \quad (2-3)$$

其中

r_w ：楔型管管壁到到軸的距離

r_c ：楔型管的最窄半徑

r_{\max} ：楔型管的入口半徑

z ：楔型管管內徑向位置

l_f ：楔型管長度

圖示如下

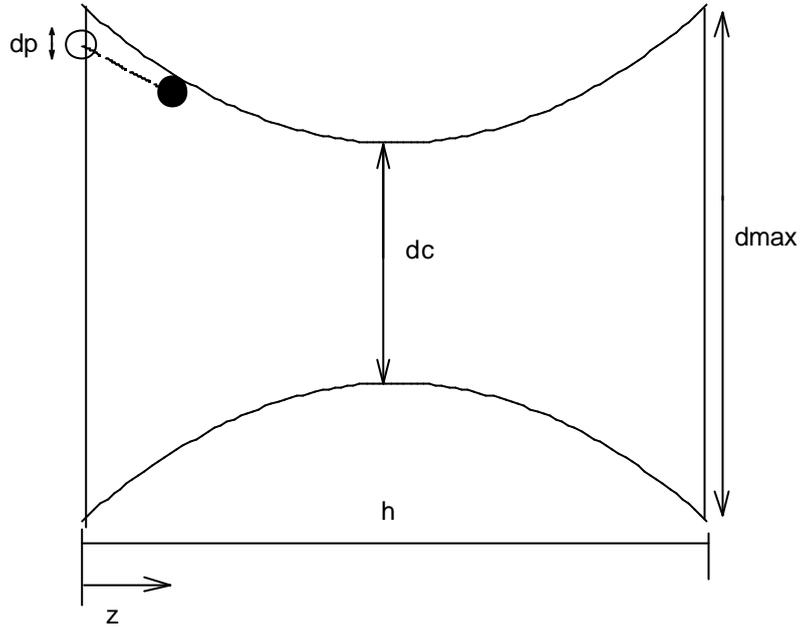


圖 (2-1) PCT 收集器的幾何示意圖

在此楔型管中若假設流體的密度一定，並為不可壓縮的牛頓流體 (incompressible Newton fluid)，其流力線函數可表示為

$$E^4 \mathbf{y} = 0 \quad (2-4)$$

若速度分量以軸對稱的二維圓柱座標系表示，則

$$u_r = \frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial z} \quad (2-5)$$

$$u_z = -\frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial r} \quad (2-6)$$

$$E^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2-7)$$

若流體滿足在收集器表面不滑動且在管中央流速最大，則邊界條件為：

$$u_r = u_z = 0 \quad \text{當 } r = r_w \quad (2-8)$$

$$\frac{\partial u_z}{\partial r} = 0 \quad u_r = 0 \quad \text{當 } r = 0 \quad (2-9)$$

則可解得此楔型管中零階、一階及二階流力線的擾動解為(Chow & Soda, 1972^[5])

$$y_0^* = 0.5(R^4 - 2R^2) \quad (2-10)$$

$$y_1^* = 0.25N_{Re,m} \frac{dR_w/dZ}{R_w} \left[\frac{1}{9}(R^4 - 6R^6 + 9R^4 - 4R^2) \right] \quad (2-11)$$

$$y_2^* = -0.5 \left[5 \left(\frac{dR_w}{dZ} \right)^2 - R_w \frac{d^2 R_w}{dZ^2} \right] \frac{(R^2 - 1)^2 R^2}{3} - 0.125N_{Re,m} \left(\frac{dR_w/dZ}{R_w} \right)^2 [32R^{12} - 305R^{10} + 750R^8 - 713R^6 + 236R^4] / 3600 \quad (2-12)$$

$$y^* = \frac{y}{u_m r_m^2} = y_0^* + R_m y_1^* + R_m^2 y_2^* \quad (2-13)$$

其中

$$Z = z / l_f$$

$$R_w = r_w / r_m$$

$$R = r / r_w$$

$$R_m = r_m / l_f$$

$$r_m = \frac{1}{l_f} \int_0^{l_f} r_w dz$$

$$N_{Re,m} = \frac{u_m r_m \mathbf{r}_f}{\mathbf{m}}$$

利用(2-8)、(2-9)兩式，可求得 r 方向與 z 方向的楔型管速度分佈(Chiang & Tien, 1985^[6])

$$u_{r0}^* = -2 \frac{dR_w/dZ}{R_w} (R^3 - R) \quad (2-14)$$

$$u_{r1}^* = \frac{0.25}{R} N_{Re,m} \left\{ F \left[\frac{d^2 R_w/dZ^2}{R_w} - \left(\frac{dR_w/dZ}{R_w} \right)^2 \right] + \frac{dF}{dZ} \frac{dR_w/dZ}{R_w} \right\} \quad (2-15)$$

$$u_{r2}^* = -0.5 \left\{ \left[9 \frac{dR_w}{dZ} \frac{d^2 R_w}{dZ^2} - R_w \frac{d^3 R_w}{dZ^3} \right] \frac{G}{R} + \left[5 \left(\frac{dR_w}{dZ} \right)^2 - R_w \frac{d^2 R_w}{dZ^2} \right] \frac{dG}{RdZ} \right\}$$

$$- 0.125 N_{Re,m} \left\{ 2 \frac{dR_w / dZ}{R_w} \left[\frac{d^2 R_w / dZ^2}{R_w} - \left(\frac{dR_w / dZ}{R_w} \right)^2 \right] \frac{E}{R} + \left(\frac{dR_w / dZ}{R_w} \right)^2 \frac{dE}{RdZ} \right\}$$

$$u_{z0}^* = 2(2 - R^2) \quad (2-16)$$

$$u_{z1}^* = -\frac{0.25}{R} N_{Re,m} \frac{dF}{dR} \frac{dR_w / dZ}{R_w} \quad (2-17)$$

$$u_{z2}^* = 0.5 \left[5 \left(\frac{dR_w}{dZ} \right)^2 - R_w \frac{d^2 R_w}{dZ^2} \right] \frac{dG}{RdR} + 0.125 N_{Re,m} \left(\frac{dR_w / dZ}{R_w} \right)^2 \frac{dE}{RdR} \quad (2-18)$$

$$u_r = u_m \left(u_{r0}^* + R_m u_{r1}^* + R_m^2 u_{r2}^* \right) \frac{r_m^2}{r_w l_f} \quad (2-19)$$

$$u_z = u_m \left(u_{z0}^* + R_m u_{z1}^* + R_m^2 u_{z2}^* \right) \frac{r_m^2}{r_w^2} \quad (2-20)$$

其中

$$F = (R^8 - 6R^6 + 9R^4 - 4R^2) / 9$$

$$G = (R^2 - 1)R^2 / 3$$

$$E = (32R^{12} + 305R^{10} + 750R^8 - 713R^6 + 236R^4) / 3600$$

如此，我們便可得到 PCT 楔型管中流場的分佈，並可更深入的了解膠體粒子在此流場中運動的各種物理現象。

2-2 膠體粒子的軌跡方程式

膠體粒子的軌跡主要受到 Langevin 方程式(Ramarao et al. , 1994^[7]; Chang & Whang , 1997^[8] , 1998^[9]) 的影響 , Langevin 方程式主要是敘述膠體粒子上的力平衡現象 , 表示如下 :

$$m_p \frac{dV}{dt} = F_d + F_r + F_e \quad (2-21)$$

其中

m_p : 膠體粒子的質量

V : 膠體粒子的速度

t : 時間

F_d : 流體拖曳力

F_r : 隨機碰撞力

F_e : 外力

流體拖曳力 F_d 可表示如下 :

$$F_d = m_p \mathbf{b}(u_s - V) \quad (2-22)$$

其中

u_s : 流體速度

V : 膠體粒子速度

b : 磨擦係數

對於一球型膠體粒子 , 在低雷諾數下可將 β 表示為 :

$$b = \frac{6\mu a_p m}{C_s m_p} \quad (2-23)$$

其中

μ : 流體黏度

a_p : 膠體粒子半徑

C_s : Cunningham 修正因子

膠體粒子隨機碰撞力 F_r 則表示如下 :

$$F_r = m_p A(t) \quad (2-24)$$

其中

$A(t)$: 隨機布朗加速度 (Random Brownian Acceleration)

今日所謂的布朗運動，是在西元 1872 年時 Robert Brown 使用光學顯微鏡觀察花粉時，發現這些花粉粒子不斷的重複複雜與不規則的運動。本文所設定的理論模式中，假定 $A(t)$ 獨立於膠體粒子速度 $V(t)$ 外，另外視布朗運動為一隨機過程，其 $A(t)$ 可表示如下：

$$\begin{cases} \langle A(t) \rangle = 0 \\ \langle A(t)A(t+t) \rangle = K_1 d(t-t) \end{cases} \quad (2-25)$$

其中 $d(t-t)$ 為一脈衝函數 (impulse function)， t 則為一極短時間。

外力 F_e 可表示如下：

$$F_e = F_{LO} + F_{DL} \quad (2-26)$$

其中

F_{LO} ：凡得瓦爾作用力

F_{DL} ：電荷排斥力

由於在本論文中所探討的氣懸膠是在一流速相當快的環境，膠體粒子的粒徑也十分小，在凡得瓦爾作用力及電荷排斥力的表現上相較於流體拖曳力(F_d)及隨機碰撞力(F_r)時並不明顯，所以在此我們不考慮此二力。

在本論文中除了流體拖曳力(F_d)、隨機碰撞力(F_r)及外力以外(F_e)，又多考慮了重力項(F_G) (Chi Tien, 1989^[10])，而重力項將會影響接下來要模擬的速度項，讓模擬結果更貼近真實情況， F_G 的表示式如下：

$$F_G = \frac{4}{3} \rho a_p^3 (\rho_p - \rho_f) g$$

其中

a_p ：膠體粒子半徑

ρ_p ：膠體粒子密度

ρ_f ：流體密度

在速度項的描述裡，氣懸膠的膠體粒子的運動軌跡共可分為 z 及 r 方向，因此必須將速度項分為 v_z 及 v_r 兩項做討論。

總和上述 Langevin 方程式可改寫為：

$$\frac{dV_z}{dt} = \mathbf{b}(u_s - V_z) + A(t) + \frac{4}{3} \frac{\rho a_p^3 (\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_f) g}{m_p} \sin \mathbf{a} \quad (2-27)$$

$$\frac{dV_r}{dt} = \mathbf{b}(u_s - V_r) + A(t) + \frac{4}{3} \frac{\rho a_p^3 (\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_f) g}{m_p} \cos \mathbf{a} \quad (2-28)$$

其中

$$\mathbf{a} = \tan^{-1} \left(\frac{dr_w}{dz} \right)$$

\mathbf{a} ：楔型管中心軸（ z ）與管壁切線方向所形成之角度

r_w ：楔型管管壁到到軸的距離

z ：楔型管管內徑向位置

V ：膠體粒子的速度

u_s ：流體的速度

β ：摩擦係數（friction coefficient）

$A(t)$ ：隨機布朗加速度（Random Brownian Acceleration）

m_p ：膠體粒子的質量

在此我們做一假設，令流體速度為定值，則可改寫為：

$$\frac{dV_z}{dt} + \mathbf{b}V_z = \mathbf{b}u_s + A(t) + \frac{4}{3} \frac{\rho a_p^3 (\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_f) g}{m_p} \sin \mathbf{a} \quad (2-29)$$

$$\frac{dV_r}{dt} + \mathbf{b}V_r = \mathbf{b}u_s + A(t) + \frac{4}{3} \frac{\mathbf{p}a_p^3(\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_f)g}{m_p} \cos \alpha \quad (2-30)$$

由於在本論文中所做的模擬，收集器的收集粒徑遠大於氣懸膠的膠體粒子粒徑，因此幾乎可將收集器楔型管管壁視為一平面， α 趨近於零，Langevin 方程式 (2-29) (2-30) 可改寫成：

$$\frac{dV_z}{dt} + \mathbf{b}V_z = \mathbf{b}u_s + A(t) \quad (2-31)$$

$$\frac{dV_r}{dt} + \mathbf{b}V_r = \mathbf{b}u_s + A(t) + \frac{4}{3} \frac{\mathbf{p}a_p^3(\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_f)g}{m_p} \quad (2-32)$$

其中定義布朗速度為

$$R_v(t) = \int_0^t e^{-bt} A(z) dz \quad (2-33)$$

帶入起始條件：

$$\text{當 } t=0 \text{ 時, } \begin{cases} V_z = V_{z0} \\ V_r = V_{r0} \\ R_v(t) = 0 \end{cases}$$

將式 (2-31) & (2-32) 積分得粒子速度為

$$V_z = V_{z0} e^{-bt} + u_s(1 - e^{-bt}) + R_v(t) \quad (2-34)$$

$$V_r = V_{r0} e^{-bt} + u_s(1 - e^{-bt}) + R_v(t) + \frac{1}{\mathbf{b}} \left(\frac{4}{3} \frac{\mathbf{p}a_p^3(\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_f)g}{m_p} \right) (1 - e^{-bt}) \quad (2-35)$$

又因為

$$V = \frac{dS}{dt} \quad (2-36)$$

定義布朗運動位移 $R_r(t)$:

$$R_r(t) = \int_0^t \left[\int_0^n e^{bz} A(z) dz \right] e^{-bn} dn$$

加上初始條件

$$\text{當 } t=0 \text{ 時, } \begin{cases} S_z = S_{z0} \\ S_r = S_{r0} \\ R_r(t) = 0 \end{cases}$$

積分可求得位移

$$S_z = S_{z0} + u_s \left(t - \frac{1}{b} (1 - e^{-bt}) \right) + \frac{V_{z0}}{b} (1 - e^{-bt}) + R_r(t) \quad (2-37)$$

$$S_r = S_{r0} + u_s \left(t - \frac{1}{b} (1 - e^{-bt}) \right) + \frac{V_{r0}}{b} (1 - e^{-bt}) + R_r(t) + \left(\frac{\frac{4}{3} \rho a_p^3 (\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_f) g}{b m_p} \right) \left(t + \frac{e^{-bt}}{b} - \frac{1}{b} \right) \quad (2-38)$$

這就是膠體粒子在楔型管中的軌跡方程式，搭配上楔型管的幾何形狀方程式即可描繪出含有布朗運動的膠體粒子在楔型管中的運動情形，進而判斷其吸附與否？而上述式(2-34)、(2-35)及(2-36)、(2-37)中 $R_v(t)$ 與 $R_r(t)$ 是兩個高斯 (Gaussian) 分佈的變量。此雙變量之計算式如下：

$$\begin{bmatrix} R_{V_i} \\ R_{r_i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{s}_{V_i} & 0 \\ \mathbf{s}_{V_{ri}} / \mathbf{s}_{V_i} & (\mathbf{s}_{ri}^2 - \mathbf{s}_{V_{ri}}^2 / \mathbf{s}_{V_i}^2)^{1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_i \\ m_i \end{bmatrix}$$

其中

$$\mathbf{s}_{V_i}^2 = \frac{q}{b} (1 - e^{-2bt})$$

$$\mathbf{s}_{r_i}^2 = \frac{q}{b^3} (2bt - 3 + 4e^{-bt} - e^{-2bt})$$

$$s_{vri}^2 = \frac{q}{b^2} (1 - e^{-2bt})^2$$

$$q = \frac{bk_B T}{m_p}$$

n_i 和 m_i 為兩個常態分佈值 (normal distributed number)。令 N_i 和 M_i 為 0 至 1 之間的兩個隨機數值 (random number), 也就是取一機率空間, 其區間為 [0, 1]。 n_i , m_i 與 N_i , M_i 的關係如下:

$$A_i = \frac{1}{\sqrt{2p}} \times \int_{-\infty}^{a_i} e^{-z^2/2} dz$$