

第三章 程式模擬與參數設定

3-1 程式建立

由上一章的 Langevin 方程式可得：

$$m_p \frac{dV}{dt} = m_p \beta(U - V) + m_p A(t) + F_e \quad (3-1)$$

由第二章中 (2-32) 可知：

$$F_e = F_{LO} + F_{DL}$$

其中 F_{LO} 與 F_{DL} 已由式 (2-40) 及 (2-46) 定義。故 (3-1) 式可寫為：

$$\frac{dV}{dt} = \beta(U - V) + A(t) + \left(\frac{F_{LO} + F_{DL}}{m_p} \right) \quad (3-2)$$

其中

V ：膠體粒子的速度

U ：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

F_{LO} ：凡得瓦爾吸引力

F_{DL} ：電荷排斥力

在此我們做一假設，令流體速度為定值，則(3-2)可改寫為：

$$\frac{dV}{dt} + \beta V = \beta U + A(t) + \frac{F_{LO}}{m_p} + \frac{F_{DL}}{m_p} \quad (3-3)$$

定義布朗速度為

$$R_v(t) = \int_0^t e^{-\beta t} A(\zeta) d\zeta \quad (3-4)$$

帶入起始條件：當 $t=0$ 時， $\begin{cases} V = V_0 \\ R_v(t) = 0 \end{cases}$ (3-5)

將式(3-3)積分得粒子速度為

$$V = V_0 e^{-\beta t} + U(1 - e^{-\beta t}) + R_v(t) + \frac{1}{\beta} \left(\frac{F_{LO} + F_{DL}}{m_p} \right) (1 - e^{-\beta t}) \quad (3-6)$$

又因為

$$V = \frac{dS}{dt} \quad (3-7)$$

積分可求得

$$S = Ut + \frac{U}{\beta} e^{-\beta t} - \frac{V}{\beta} e^{-\beta t} + R_r(t) + \left(\frac{F_{LO} + F_{DL}}{m_p} \right) t + \left(\frac{F_{LO} + F_{DL}}{\beta^2 m_p} \right) e^{-\beta t} + C_1 \quad (3-8)$$

其中 $R_r(t)$ 的定義如下：

$$R_r(t) = \int_0^t \left[\int_0^n e^{\beta \zeta} A(\zeta) d\zeta \right] e^{-\beta n} dn \quad (3-9)$$

加上起始條件

$$\text{當 } t=0 \text{ 時 } \begin{cases} S = S_0 \\ R_r(t) = 0 \end{cases} \quad (3-10)$$

可得：

$$C_1 = r_0 - \frac{U}{\beta} + \frac{V_0}{\beta} - \left(\frac{F_{LO} + F_{DL}}{\beta^2 m_p} \right) \quad (3-11)$$

故式(3-8)可寫為

$$S = S_0 + \frac{V_0}{\beta} (1 - e^{-\beta t}) + U \left[t - \frac{1}{\beta} (1 - e^{-\beta t}) \right] + R_r(t) + \left(\frac{F_{LO} + F_{DL}}{\beta m_p} \right) \left(t + \frac{e^{-\beta t}}{\beta} - \frac{1}{\beta} \right) \quad (3-12)$$

式(3-12)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：

$$\begin{bmatrix} R_{Vi} \\ R_{ri} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{Vi} & 0 \\ \sigma_{Vri} / \sigma_{Vi} & (\sigma_{ri}^2 - \sigma_{Vri}^2 / \sigma_{Vi}^2)^{1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_i \\ m_i \end{bmatrix} \quad (3-13)$$

其中

$$\sigma_{Vi}^2 = \frac{q}{\beta} (1 - e^{-2\beta t}) \quad (3-14)$$

$$\sigma_{ri}^2 = \frac{q}{\beta^3} (2\beta t - 3 + 4e^{-\beta t} - e^{-2\beta t}) \quad (3-15)$$

$$\sigma_{Vri}^2 = \frac{q}{\beta^2} (1 - e^{-2\beta t})^2 \quad (3-16)$$

$$q = \frac{\beta k_B T}{m_p} \quad (3-17)$$

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

$$A_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \times \int_{-\infty}^{a_i} e^{-\zeta^2/2} d\zeta \quad (3-18)$$

此時考慮在水溶液中，膠體粒子接近一平面時會產生一個減速效應 (retardation effect)，根據 Spielman&Fitzpatrick^[15] 定義出三個減速因子

(retardation factor) : $F_1(H)$ 、 $F_2(H)$ 、 $F_3(H)$, 其中 H 的定義與公式 (2-39)

相同。將式(3-6)及式(3-12)分別改寫為

$$V = \left\{ \left[V_0 e^{-\beta t} + U(1 - e^{-\beta t}) \right] F_2(H) + R_v(t) + \frac{1}{\beta} \left(\frac{F_{LO} + F_{DL}}{m_p} \right) (1 - e^{-\beta t}) \right\} F_1(H) F_3(H) \quad (3-19)$$

$$S = S_0 + \left\{ \frac{V_0}{\beta} (1 - e^{-\beta t}) + U \left[t - \frac{1}{\beta} (1 - e^{-\beta t}) \right] \right\} F_1(H) F_2(H) F_3(H) \\ + \left\{ R_r(t) + \left(\frac{F_{LO} + F_{DL}}{\beta m_p} \right) \left(t + \frac{e^{-\beta t}}{\beta} - \frac{1}{\beta} \right) \right\} F_1(H) F_3(H) \quad (3-20)$$

其中

$F_1(H)$: 膠體在正向之減速因子

$F_2(H)$: 膠體在拖曳力方向之減速因子

$F_3(H)$: 膠體在切線方向之減速因子

式 (3-13) 即謂膠體粒子之吸附軌跡方程式。在本論文中即採用此軌跡方程式來描述膠體粒子吸附在收集器上的軌跡路線，進而求出收集效率。

3-2 收集效率 (collection efficiency) 的定義

楔型管收集器對於所收集到的膠體粒子多寡可藉由收集效率看出，一般總收集效率 (overall collection efficiency) 的定義如下：

$$E = \frac{C_{in} - C_{out}}{C_{in}} \quad (3-21)$$

其中

E：總收集效率 (overall collection efficiency)

C_{in} ：流入過濾床的膠體粒子濃度或個數

C_{out} ：流出過濾床的膠體粒子濃度或個數

若將過濾床視為由許多過濾收集器的小單元所組成，則每個單元收集器的收集效率即為單位收集效率 (unit collection efficiency)：

$$\eta = \frac{dm}{dM} \quad (3-22)$$

其中

η ：單位收集效率

M：流過收集器的膠體粒子數目

m：吸附的膠體粒子數目

若單位楔型管收集器內只含有單一個收集器，其收集效率可稱為單一收集效率（single-collector efficiency）

$$\eta_s = \frac{dm}{dM} \quad (3-23)$$

其中

η_s ：單一收集效率

若單位楔型管收集器內含有多個收集器，其收集效率可稱為多重收集效率（multiple-collector efficiency）

$$\eta_m = \frac{dm_1}{dM_1} + \frac{dm_2}{dM_2} + \dots \quad (3-24)$$

其中

η_m ：多重收集效率

3-3 參數的設定

本論文之電腦模擬中使用了許多參數，我們將所有的參數作整理後列於表 (3-1) 及 (3-2)，並且定出我們所設定的值。

| No. of Case | N_{E1} | N_{E2} | N_{DL} | N_{LO} |
|-------------|----------|----------|----------|----------|
| A | 105 | 1 | 10.75 | 7 |
| B | 50 | 1 | 5.02 | 7 |
| C | 77 | 1 | 10 | 7 |
| D | 0 | 1 | - | 7 |

表 (3-1) 本研究所使用的四套 DLVO 理論參數值。

| 參數 | 範圍 | 參考資料 |
|---------------|------------------------------|------|
| k_B | 1.38×10^{-16} erg/k | 設定值 |
| T | 293 k | 設定值 |
| d_f | 20 μ m | 設定值 |
| d_p | 1 μ m | 設定值 |
| ε | 0.4 | 設定值 |
| μ | 1 cp | 設定值 |
| ρ_f | 1 g/cm ³ | 設定值 |
| ρ_p | 1 g/cm ³ | 設定值 |
| U | 0.1~0.2 cm/s | - |
| C_{in} | 100ppm | 設定值 |

表 (3-3) 參數設定值