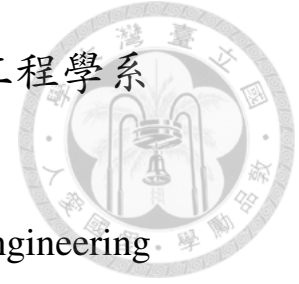


國立臺灣大學工學院工程科學及海洋工程學系  
碩士論文



Department of Engineering Science and Ocean Engineering

College of Engineering

National Taiwan University

Master Thesis

建構在細胞膜離子通道內傳輸行為的PNP-NS數學與數值  
模型

*On a PNP-NS mathematical and numerical models for  
simulating transport phenomenon in cell membrane ion  
channel*

薛向成

**Siang-Cheng Syue**

指導教授：許文翰 博士

Advisor : Tony Wen-Hann Sheu, Ph.D.

中華民國104年九月

September, 2015

## 誌謝



這份論文的完成，首先要感謝許文翰教授的指導，謝謝您這兩年來的諄諄教誨，從引領我進入數值模擬的世界，漸漸到使我對研究產生興趣，同時也教導我做人處世的道理和態度；從您對學術的熱情和執著，對學生來說都是最佳的模範，我會永遠銘感於心，謝謝您！

感謝趙修武教授、林太家教授、葉禮賢教授，謝謝您們抽空來參與學生的口試，並給予許多的建議及指導，讓學生受益良多，真的很感謝您們！

謝謝在 SCCS 實驗室的每一位，讓我在這裡留下很好的回憶；感謝高仕超學長(超哥)，不論在生活或是研究上都給我很多的建議，以及幫我修改投影片，在我口試前一個晚上幫我印論文投影片，謝謝您一路上的幫忙。感謝 Yannick(亞寬)，讓我勇於嘗試用英文對話，還記得與您和 A 胖第一次騎腳踏車到關渡，是我之前不曾有過的體驗，真的非常開心。感謝黃宇倫學長，謝謝您在我口試時幫了我許多忙。感謝蔣承佑學長(A 胖)，從我開始進實驗室就一路帶我，也幫助我解決許多在研究上遇到的困難，期待您下次來彰化再一起去吃控肉飯。感謝柳冠碩學長(Rex)，謝謝您幫我安裝軟體，也傳授我許多製作網格的技巧。感謝楊耀宇學長(YYY)，不管在生活上的小知識，或是研究的內容，都幫了我不少忙。感謝我的同學王士哲，在最後一起奮鬥趕論文的期間互相勉勵，也希望您之後工作順利。感謝高千渝學妹，謝謝妳幫大家買晚餐，凡事要對自己有信心，相信妳自己，一定可以成功的。

最後，感謝所有幫助過我的人！謝謝你們！在未來的路上，我會繼續努力！

# 中文摘要



在有限差分法的架構下，本論文發展一高階數值方法來計算卡氏座標與曲線座標兩系統之間矩陣張量的項並且保持SCL之特性，以求解在非正交座標之下電液動(EHD)之非線性動力系統方程，此系統包含了描述外加電場電位勢之Laplace方程、描述壁面電位勢之Poisson方程、描述離子濃度分布之Nernst-Planck方程以及由庫倫力所驅動的不可壓縮Navier-Stokes方程組。論文之內容主要是使用離子守恆Poisson-Nernst-Planck(PNP)方程組來描述電滲流模型，以觀察流速對離子分布的影響，並描述受zeta電位所產生之電雙層及電荷擴散層等物理行為，以及模擬細胞膜離子通道內的傳輸行為。

關鍵字：空間守恆律；SCL保持；Poisson-Nernst-Planck方程組；Navier-Stokes方程組；PPE方程；緊緻格式；波浪狀流道；庫倫力；

# Abstract



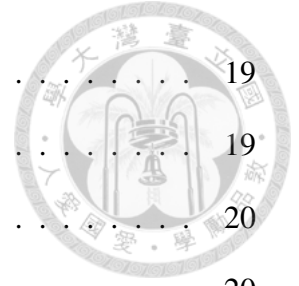
In this study a high order scheme based on the combined compact difference method is developed to compute the metric tensor terms between the Cartesian coordinate and curvilinear coordinate systems subject to the Space Conservation Law (SCL). A high order scheme for the pressure is also proposed to solve the nonlinear electrohydrodynamic system in different channel types. The system under investigation includes the Poisson equation for the external potential, the Poisson-Nerest-Planck (PNP) equation which describes the distribution of ion concentration and the incompressible Navier-Stokes (NS) equation driven by Coulomb force. The transformation terms are computed by the sixth-order accurate combined compact difference scheme subject to the Space Conservation Law. This scheme is applied to simulate the electroosmotic flow from physical domain to computational domain. The electroosmotic flow details in planar and channels are revealed through this study with the emphasis on the formation of Coulomb force. The competition among the pressure gradient, diffusion and Coulomb forces leading to the convective electroosmotic flow motion is also investigated in detail. Finally, we also simulate the transport phenomenon in ion channel of cell membrane to observe its physical behavior.

**Keywords:** Space Conservation Law; SCL-preserving; PNP; NS; PPE; three-point stencil; combined compact difference; wavy; Coulomb force



# 目錄

摘要 . . . . .	i
Abstract . . . . .	ii
第一章 序論	
1.1 前言 . . . . .	1
1.2 研究動機 . . . . .	3
1.3 文獻回顧 . . . . .	5
1.4 論文大綱 . . . . .	7
第二章 理論背景	
2.1 細胞結構之簡介 . . . . .	8
2.2 細胞膜之簡介 . . . . .	10
2.3 離子通道之機制 . . . . .	11
2.4 電雙層之介紹 . . . . .	13
2.5 電滲流現象 . . . . .	16
第三章 數學模型之建立	
3.1 基本假設 . . . . .	18
3.2 統御方程式 . . . . .	19



3.2.1	描述外加電場電位勢之Laplace方程式 . . . . .	19
3.2.2	描述壁面電位勢之Poisson方程式 . . . . .	19
3.2.3	描述正負離子分佈之Nernst-Planck方程式 . . . . .	20
3.2.4	不可壓縮黏性流之Navier-Stokes方程式 . . . . .	20

#### 第四章 座標轉換方程

4.1	於卡式座標上無因次之Electrohydrodynamics方程組 . . . . .	23
4.2	於曲線座標上無因次之Electrohydrodynamics方程組 . . . . .	25
4.3	座標轉換矩陣之計算 - 滿足SCL性質之矩陣張量項之推導 . . . . .	27
4.4	數值驗證 . . . . .	30
4.4.1	簡單外形之網格 . . . . .	30
4.4.2	複雜外形之網格 . . . . .	30

#### 第五章 數值模型

5.1	時間之離散 . . . . .	37
5.2	空間之離散 - Combined Compact difference method . . . . .	37
5.2.1	二階偏導數項之緊緻格式 . . . . .	38
5.2.2	一階偏導數項頻散保持之緊緻格式 . . . . .	39

#### 第六章 壓力控制方程之推導

6.1	傳統壓力控制方程式 . . . . .	43
6.2	加速壓力收斂之壓力控制方程式 . . . . .	44
6.3	壓力方程之邊界條件及其評估 . . . . .	44
6.4	卡式座標下高階壓力方程之離散 . . . . .	49
6.5	曲線座標下高階壓力方程之離散 . . . . .	50

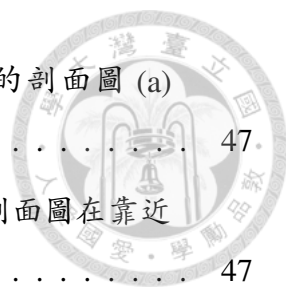


6.6	計算程序	52
第七章 程式驗證		
7.1	流體、電方程組之驗證	54
7.1.1	Navier-Stokes 方程之實解驗證	54
7.1.2	方腔拉穴流問題之測試	55
7.1.3	後向階梯流問題之測試	57
7.1.4	Poisson-Nernst-Planck (PNP) 方程組之實解驗證	58
7.1.5	PNP-NS 方程組之實解驗證	59
7.2	數值驗證之結果	60
第八章 仿離子通道之數值模擬		
8.1	問題之描述	72
8.1.1	參數設定	72
8.2	二維電滲流之流場分析	73
8.2.1	計算模型之初始與邊界條件	73
8.2.2	討論	78
第九章 結論		
9.1	研究成果與討論	99
9.2	未來工作與展望	100
附錄A		
	以逆變速度所表示之動量方程中各項整理之形式	101

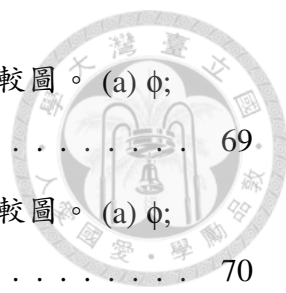


# 圖示目錄

1.1	細胞新陳代謝之示意圖 . . . . .	4
1.2	細胞營養合成及分解之示意圖 . . . . .	4
1.3	在細胞膜上大分子所形成之孔隙 [18] . . . . .	4
2.1	細胞結構之示意圖 . . . . .	9
2.2	細胞膜結構之示意圖 . . . . .	10
2.3	離子通道開與關之示意圖 . . . . .	12
2.4	離子通道的種類 . . . . .	12
2.5	Gouy-Chmapman 電雙層示之意圖 . . . . .	15
2.6	Stern 電雙層之示意圖 . . . . .	15
2.7	電滲流之示意圖 . . . . .	16
2.8	傳統壓力驅動流體至完全發展流的速度剖面之示意圖 . . . . .	17
2.9	電滲流至完全發展流的速度剖面之示意圖 . . . . .	17
4.1	(a)扇形網格；以及數值解和實解之比較 (b) $x_{\xi}$ ；(c) $x_{\eta}$ . . . . .	32
4.2	(a)波浪不規則形網格；以及數值解和實解之比較 (b) $x_{\eta}$ ；(c) $y_{\xi}$ ；(d) $x_{\eta\eta}$ ；(e) $y_{\xi\xi}$ . . . . .	33
4.3	使用兩種不同方法之 $x_{\xi\xi}$ 誤差的分布圖 (a) 原始 CCD；(b) SCL-CCD . . . . .	34
4.4	使用兩種不同方法之 $y_{\eta\eta}$ 誤差的分布圖 (a) 原始 CCD；(b) SCL-CCD . . . . .	34
4.5	使用兩種不同方法之 $x_{\xi}$ 誤差的等高圖 (a) 原始 CCD；(b) SCL-CCD . . . . .	35
4.6	使用兩種不同方法之 $y_{\eta}$ 誤差的等高圖 (a) 原始 CCD；(b) SCL-CCD . . . . .	35



6.1	使用四種不同壓力邊界條件所算出之壓力在中心線的剖面圖 (a) $x = 0.5$ ; (b) $y = 0.5$ . . . . .	47
6.2	使用四種不同壓力邊界條件所算出之壓力在中心線的剖面圖在靠近壁面所放大的區域 (a) $x = 0.5 : A, B$ ; (b) $y = 0.5 : C, D$ . . . . .	47
6.3	使用四種不同壓力邊界條件所算出之壓力在中心線 $x = 0.5$ 的剖面圖在靠近壁面所放大的區域 (a) $y = 0.99 \sim 1$ ; (b) $y = 0 \sim 0.01$ . . . . .	48
6.4	使用四種不同壓力邊界條件所算出之壓力在中心線 $y = 0.5$ 的剖面圖在靠近壁面所放大的區域 (a) $x = 0 \sim 0.01$ ; (b) $x = 0.99 \sim x = 1$ . . . . .	48
6.5	計算之流程圖 . . . . .	53
7.1	二維方腔拉穴流問題之示意圖 . . . . .	56
7.2	後向階梯流問題之示意圖 . . . . .	57
7.3	圖示二維實解Navier-Stokes方程組解的收斂斜率 . . . . .	60
7.4	二維Navier-Stokes方程組速度與壓力之實解與數值解之比較圖。(a) $u$ ; (b) $v$ ; (c) $p$ . . . . .	61
7.5	二維Navier-Stokes方程組速度與壓力之實解與數值解之比較圖。(a) $u$ ; (b) $v$ ; (c) $p$ . . . . .	62
7.6	二維拉穴流場在 $Re = 100$ 時之流線分佈圖 . . . . .	63
7.7	二維拉穴流場在 $Re = 100$ 時與文獻 [11] 的中心線速度剖面圖之比較 . . . . .	63
7.8	二維拉穴流場之流線分佈圖與文獻 [11] 的中心線速度剖面圖之比較。(a) $Re = 400$ ; (b) $Re = 400$ ; (c) $Re = 1000$ ; (d) $Re = 1000$ . . . . .	64
7.9	二維拉穴流場之流線分佈圖與文獻 [11] 的中心線速度剖面圖之比較。(a) $Re = 5000$ ; (b) $Re = 5000$ ; (c) $Re = 7500$ ; (d) $Re = 7500$ . . . . .	65
7.10	二維後向階梯流問題之不規則物理域網格及其放大圖 . . . . .	66
7.11	二維後向階梯流之速度剖面圖與文獻 [12] 之比較。(a) $x = 3$ ; (b) $x = 7$ ; (c) $x = 15$ . . . . .	67
7.12	圖示二維具實解之Poisson-Nernst-Planck方程組解的收斂斜率 . . . . .	68



7.13 二維Poisson-Nernst-Planck方程組之實解與數值解之比較圖。(a)  $\phi$ ;  
(b)  $\psi$ ; (c)  $n_-$ ; (d)  $n_+$  . . . . . 69

7.14 二維Poisson-Nernst-Planck方程組之實解與數值解之比較圖。(a)  $\phi$ ;  
(b)  $\psi$ ; (c)  $n_-$ ; (d)  $n_+$  . . . . . 70

7.15 圖示二維具實解之PNP-NS方程組解的收斂斜率 . . . . . 71

8.1 二維電滲流離子通道物理模型之示意圖。 . . . . . 75

8.2 細胞膜上離子通道之示意圖。 . . . . . 75

8.3 二維電滲流于平行流道內的計算區域示意圖。 . . . . . 76

8.4 二維電滲流于曲線流道內的計算區域示意圖。 . . . . . 76

8.5 離子通道流之示意圖。 . . . . . 77

8.6 離子通道流問題一。 . . . . . 77

8.7 離子通道流問題二。 . . . . . 77

8.8 比較因壓力驅動流與電滲流所導致的速度剖面圖。 . . . . . 80

8.9 比較因壓力驅動流與電滲流所導致的壓力剖面圖。 . . . . . 80

8.10 電滲流在平行流道中於 $x = 2$ 之暫態速度剖面圖。(a)  $t = 10^{-8}$  ;(b)  
 $t = 10^{-4}$  ;(c)  $t = 3.0 \times 10^{-4}$  ;(d)  $t = 5.0 \times 10^{-4}$  ;(e)  $t = 7.0 \times 10^{-4}$  ;(f)  
 $t = 9.0 \times 10^{-4}$  ;(g)  $t = 10^{-3}$  ;(h)  $t = 2.0 \times 10^{-3}$  ;(i)  $t = 3.0 \times 10^{-3}$  。 . . 81

8.11 平行流道內解的等高分佈圖。(a)  $\phi$ ; (b)  $\psi$ ; (c)  $n_-$ ; (d)  $n_+$  . . . . . 82

8.12 平行流道內解的等高分佈圖。(a)  $u$ ; (b)  $v$ ; (c)  $p$  . . . . . 83

8.13 平行流道內之速度向量圖。 . . . . . 84

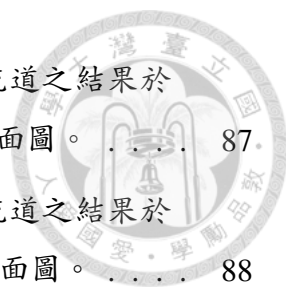
8.14 平行流道內之流線圖。 . . . . . 84

8.15 於 $x = 2$ 處之正、負離子濃度之剖面圖。 . . . . . 84

8.16 於 $x = 2$ 處比較對流、擴散、遷移對離子濃度的影響。 . . . . . 85

8.17 由數值模擬結果建構電雙層中的擴散層與固定層。 . . . . . 85

8.18 本論文所提出之PPE與文獻 [13]內DFC方法計算平行流道之結果於  
三個不同位置 (a)  $x = 0$ ; (b)  $x = 2$ ; (c)  $x = 4$  之速度 $u$ 的剖面圖。 . . . . 86



8.19	本論文所提出之PPE與文獻 [13]內DFC方法計算平行流道之結果於三個不同位置 (a) $x = 0$ ; (b) $x = 2$ ; (c) $x = 4$ 之速度 $v$ 的剖面圖。 . . . . .	87
8.20	本論文所提出之PPE與文獻 [13]內DFC方法計算平行流道之結果於三個不同位置 (a) $x = 0$ ; (b) $x = 2$ ; (c) $x = 4$ 之壓力 $p$ 的剖面圖。 . . . . .	88
8.21	曲線流道內解的等高分佈圖。(a) $\phi$ ; (b) $\psi$ ; (c) $n_-$ ; (d) $n_+$ . . . . .	89
8.22	曲線流道內解的等高分佈圖。(a) $u$ ; (b) $v$ ; (c) $p$ . . . . .	90
8.23	曲線流道內之速度向量圖。 . . . . .	91
8.24	曲線流道內之流線圖。 . . . . .	91
8.25	曲線流道於 (a) $ab$ ( $x = 1.2$ ); (b) $cd$ ( $x = 2$ ); (c) $ef$ ( $x = 2.8$ )三個不同截面之示意圖。 . . . . .	91
8.26	本論文所提出之PPE與文獻 [13]內DFC方法計算曲線流道之結果於三個不同位置 (a) $ab$ ( $x = 1.2$ ); (b) $cd$ ( $x = 2$ ); (c) $ef$ ( $x = 2.8$ ) 比較速度 $u$ 的剖面圖。 . . . . .	92
8.27	本論文所提出之PPE與文獻 [13]內DFC方法計算曲線流道之結果於三個不同位置 (a) $ab$ ( $x = 1.2$ ); (b) $cd$ ( $x = 2$ ); (c) $ef$ ( $x = 2.8$ ) 比較速度 $v$ 的剖面圖。 . . . . .	93
8.28	本論文所提出之PPE與文獻 [13]內DFC方法計算曲線流道之結果於三個不同位置 (a) $ab$ ( $x = 1.2$ ); (b) $cd$ ( $x = 2$ ); (c) $ef$ ( $x = 2.8$ ) 比較壓力 $p$ 的剖面圖。 . . . . .	94
8.29	離子通道流問題一的等高分佈圖。(a) $u$ ; (b) $v$ ; (c) $p$ . . . . .	95
8.30	離子通道流問題一之速度向量圖。 . . . . .	96
8.31	離子通道流問題一之流線圖。 . . . . .	96
8.32	離子通道流問題一於九個不同截面之示意圖。 . . . . .	96
8.33	離子通道流問題二的等高分佈圖。(a) $u$ ; (b) $v$ ; (c) $p$ . . . . .	97
8.34	離子通道流問題二之預想流向示意圖。 . . . . .	98
8.35	離子通道流問題二之速度向量圖。 . . . . .	98
8.36	離子通道流問題二之流線圖。 . . . . .	98



# 表格目錄

4.1	扇形網格轉換成均勻網格其矩陣張量項在三種不同方法下的 $L_2$ norms比較 . . . . .	31
4.2	波浪不規則形網格轉換成均勻網格其矩陣張量項在三種不同方法下的 $L_2$ norms比較 . . . . .	31
7.1	二維Navier-Stokes方程組在不同網格大小之結果。 . . . . .	60
7.2	二維具實解之Poisson-Nernst-Planck方程組在不同網格大小的計算結果。 . . . . .	68
7.3	二維具實解之Poisson-Nernst-Planck方程組在不同網格大小的計算結果。 . . . . .	71
1	方程式(1)中各項整理之形式 . . . . .	101

## 符號說明



	英文名稱	中文名稱
$D_{\pm}$	Diffusion coefficient of the cation/anion; $m^2/s$	正負離子之擴散係數
$e$	Elementary charge; $e = 1.602 \times 10^{-19}C$	單一電子之帶電量
$E$	Strength of the applied electric field; V/m	外加電場
$E_x$	Applied electric field along x direction; V/m	x方向之外加電場
$G_x$	The ratio of the EDL energy with respect to kinetic energy	EDL能量和動能比
$H$	Channel height; m	流道寬度
$k_B$	Boltzmann constant; $k_B = 1.3805 \times 10^{23}J/K$	波茲曼常數
$n_0$	Bulk concentration; $m^{-3}$	總溶液離子濃度
$n_{\pm}$	Bulk concentration of cation/anion; $m^{-3}$	正負離子濃度
$T$	Absolute temperature; K	溫度
$T_{ref}$	Reference temperature; K	參考溫度
$t$	time; s	時間
$U_{ref}$	Reference velocity; m/s	參考速度
$\underline{u}$	Velocity vector; m/s	速度向量
$p$	Pressure; Pa	壓力
$Re$	Reynolds number	雷諾數
$Sc$	Schmidt number	施密特數
$z_{\pm}$	Valence of ion, $z_+ = z_- = z$	離子價



## 希臘字母

	英文名稱	中文名稱
$\psi$	Electrical potential in EDL; V	電位勢
$\rho$	Fluid density; $kg/m^3$	流體密度
$\rho_e$	Space charge density; $C/m^3$	靜電荷密度
$\epsilon$	Dielectric constant (dimensionless)	相對介電常數
$\epsilon_0$	Permittivity of vacuum; C/mV	真空中之介電常數
$\lambda_D$	Debye length; m	電雙層特徵厚度
$\kappa$	Debye-Hückel, $\kappa = 1/\lambda_D$ ; 1/m	Debye-Hückel 參數
$\zeta_0$	Surface Zeta potential; V	Zeta 電位
$\sigma$	Electric conductivity; s/m	電導率
$\phi$	Externally applied electrical potential; V	外加電場之電位勢
$\mu$	Dynamic viscosity; kg/ms	靜粘滯係數




# 第一章

## 序論

### 1.1 前言

隨著科技的日新月異，產品往往都朝著精密、微小的方向來做研發，所追求的尺度可達微米、奈米的等級，這就是微機電技術(Micro Electro Mechanical System，簡稱MEMS)。微機電技術是結合機械和電子元件來製造微型的裝置或系統，這包括了積體電路封裝、物質科學、電子工程、化學工程、流體工程、光學，這些裝置或是系統在微觀的尺度下具檢測和控制的功能，並在巨觀的尺度下可有效的產生效應；在生物醫學方面的研究包括像是細胞組織的培養、細胞膜內物質的傳輸行為、細菌的趨化作用等都是非常熱門的主題。

最近微流體生物晶片的研發深受矚目，其定義是運用分子生物學、生化反應等原理在矽晶片、玻璃或高分子的基材，結合微機電技術與生物醫學技術，設計及製作具有微小化、快速、平行處理能力的生物及醫療用檢測元件，可在微小面積上快速地進行大量的生化感測或反應；廣義可被區分成DNA核酸探針晶片及實驗室晶片兩類。利用微流體生物晶片進行生物醫學檢測分析，具有降低人工操作的實驗誤差及提高系統的穩定性，可將其運用在基因表現、疾病診斷、藥物篩選、基因定序、蛋白質分析等領域。



關於細胞研究方面，其實觀察生活周遭，不管是搭捷運還是公車，通常都會看到乘客們坐著單手使用手機的景象，一邊按手機，眼睛一邊看著螢幕上顯示的文字，可以一次同時做很多動作。在我們身體裡約有270種、60兆個細胞，當用指尖按手機螢幕時，指尖的細胞會變形，感受到壓力的蛋白質會產生改變，細胞內側及外側間的離子也就會不斷進出交換。當手指在動時，會有大量的肌動蛋白纖維不斷地滑動，且該運動訊息會不斷地傳回大腦，運動訊息之所以能傳回大腦，是因為電位在神經細胞的表面以接力的方式流動著，這代表細胞內的蛋白質以驚人的速度在運動，而眼睛看著手機畫面也代表著光子傳達到眼球深處的桿狀細胞以及錐狀細胞，因此眼睛才能夠看到畫面。此外，雖然眼睛無法直接觀察到，但身體裡的細胞經常藉由新陳代謝而產生新的細胞，當感染了流感或病毒，身體的骨髓也許正在製造大量的白血球，產生的白血球移置血管中被感染的部位，一部分的細胞會變成細長型的偽足，說不定有大量的白血球從血管中排出，每當看到一個人時，心中總有各式各樣的想像。



## 1.2 研究動機

隨著奈米生物技術的發展，微機電系統和微流體技術越來越受到重視，它包含的範圍廣泛：微泵浦、注入器、微型過濾器、混合器以及分離器等，雖然微流體技術仍然屬於微機電的一種，不過它並不完全只是縮小了元件的尺寸，即使是相同的流體，在微小通道中的流體行為和平常所接觸巨觀的流體行為並不完全相同，因此如何了解流體在微小通道中的操縱功能才是關鍵之所在。

電滲流即是其中一種利用外加電場所產生庫倫力來驅動流體移動的方法，可以藉由控制電壓，來控制流體分離或是混合的目的；而在電滲流模型裡的流體和電極板的交介面，離子會在金屬表面形成固定層和擴散層，人們稱之為電雙層。雖然電雙層的厚度約為0.2-20奈米，但是在電極的活化和吸附過程中扮演著極重要的角色，所以電雙層的研究對於電滲流有很大的意義。

此外，在細胞新陳代謝方面，可以分為分解代謝和合成代謝，分解代謝指的是將細胞內的廢棄物，像是發酵的產物、酸性物質、酒精、二氧化碳等經由細胞膜排放到細胞外部；合成代謝指的是細胞外部所提供生物合成的養分，藉由細胞膜進入細胞內並配合分解代謝產生一部分的能量來合成大分子及其他的細胞成分。細胞內的物質通常為水溶性物質，像是各種離子或是醣類，它們之所以能進出細胞膜都是透過由蛋白質所聚集在細胞膜上所形成的孔隙(也就是所謂的離子通道)。即使一個人直立著不動，其身體裡的細胞也永不休息的活動著，持續製造蛋白質、體內的電位不停在流動、離子之間的通道也不停地反覆開關。而這些細胞約有60兆個，且外觀相當的複雜。每個細胞都分別配置著製造大量蛋白質的工廠，生產約有10萬種蛋白質，就像是細胞內、外也建構了讓人一目瞭然的如宅配公司以及物流配送網路。

人類如何看到東西、如何進行思考，這些問題巨觀來看好像看不出所以然來，但如果以人體內細胞如何活動、蛋白質如何形成、離子是什麼等微觀的角度來觀察，將更容易進一步的了解人體，因此藉由透過求解其控制方程式，得以幫助吾人了解細胞膜離子通道內物質的傳輸行為，以期更清楚細胞運作的機制。

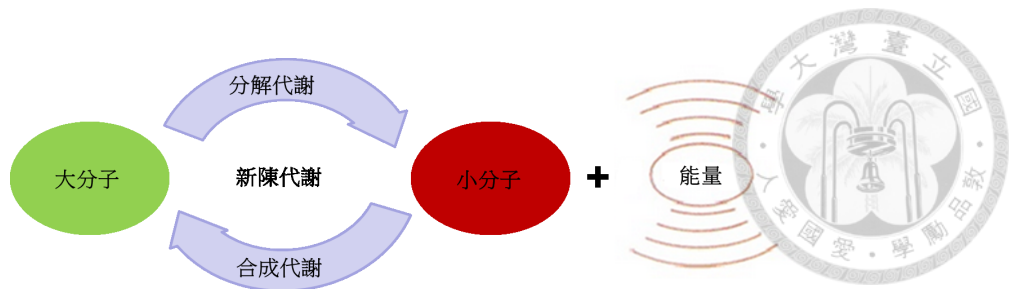


圖 1.1: 細胞新陳代謝之示意圖

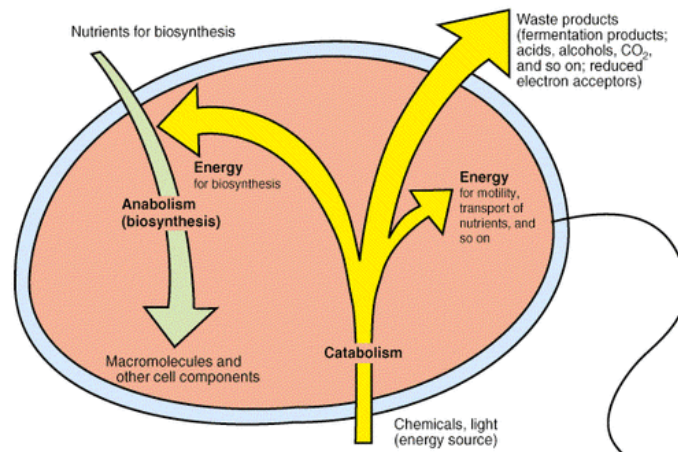


圖 1.2: 細胞營養合成及分解之示意圖

(<http://www.expertsmind.com/topic/microbiology/nutrition-and-metabolism-92630.aspx>)

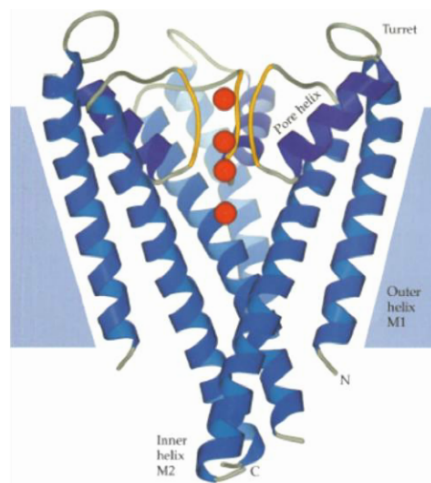


圖 1.3: 在細胞膜上大分子所形成之孔隙 [18]




### 1.3 文獻回顧

離子對細胞的生命活動有很大的重要性，並且發揮重要的作用，但帶電的離子不能自由穿越細胞膜，只能透過細胞膜上的離子通道進行傳輸，離子通道因此受到生物學家廣泛的關注。1909年諾貝爾化學獎得主 Wilhelm Ostwald 在1890年就推測在活體組織中所量測到的電流訊號，應該是細胞膜中離子進出所引起，這個想法很快就被大家接受；1950年，兩位英國學者 Alan Hodgkin 與 Andrew Huxley 對烏賊巨大軸突細胞膜上的離子傳導進行研究，其研究結果顯示，透過神經細胞膜的離子傳輸，所產生的訊號可透過一個個神經細胞，以接力的方式傳遞，這些反應中最主要的角色就是鈉離子( $Na^+$ )與鉀離子( $K^+$ )。因此，早在五十多年前，科學家就已經對離子通道的功能有了大概的了解，這些離子通道必須選擇性地只讓一種離子通過，而這些通道也必須有能力打開、關閉、或只讓離子往同一個方向流動。

對於離子通道的高選擇性科學家當初只是推測，一直到2003年諾貝爾化學獎得主 Roderick MacKinnon 在離子通道的結構與作用機制上的研究，他做出了鏈黴菌的離子通道蛋白質KcsA的高解析三維結構影像，並首度從原子層次去了解離子通道的作用方式。KcsA離子通道中有一種「濾嘴」，稱之為「selectivity filter」，能讓鉀離子( $K^+$ )通過，卻不允許體積更小的鈉離子( $Na^+$ )通過，而離子通道的開關會受到細胞的控制，Roderick MacKinnon 發現離子通道的底部有個閘門，當離子通道接收到特定的訊號時，離子通道蛋白質結構便會發生改變，因此造成閘門的開關。此一對離子通道的結構與作用機制的研究，是生物化學、生物物理等領域的一大突破，也為神經疾病、肌肉與心臟疾病的新藥物開發，指引了新的方向。

而電滲流最早可以追溯到俄國物理學家 Von. Ruess 於1809年所發現的電動現象 [7]，真正開始被應用則是在1937年由瑞典科學家 Tiselius 所設計的電泳儀；在1879年 Helmholtz 提出了最早的雙電層理論，不過由於實驗模型過於簡化，無法解釋電動現象；1910-1913年間 Gouy 和 Chapman 提出了 Zeta 電位，及固體和液體之間的電位和溶液中的電位差(稱為 Zeta 電位)；1924年 Stern 對 Gouy-Chapman 的模型做了更進一步的修正，將擴散雙電層再分為兩層，即貼近表面的 Stern layer (固



定層)和 Gouy-Chapman 模型中的 diffuse layer (擴散層)，目前最常使用的電雙層模型即為 Gouy-Chapman-Stern 模型。1998年Patankar以及Hu推導了由電滲力在二維平板中的電位及流速的解析解 [8]；2001年Dutta以及Beskok推導出由電滲力和壓力在二維平板流的電位以及流速的解析解 [1]；2002年Alam以及Bowman使用了Debye-Hückel假設，模擬直流道內的電滲流，並觀察Debye length 厚度對電滲流速度的影響 [10]；2005年Qian以及Bau推導出二維平板電滲流在上、下壁面施加不同的zeta電位所對應的電位和流速的解析解 [5]。

## 1.4 論文大綱



第一章首先簡介電滲流的應用領域，研究動機以及文獻回顧。第二章描述離子通道的理論架構，它包括了細胞結構之簡介、細胞膜之簡介、離子通道的機制，以及電雙層理論與電滲流現象；第三章詳細介紹爲了模擬電滲流模型所使用的統御方程式，並解釋其所代表的意義以及其無因次化的方程組；第四章說明座標轉換方程，它包括卡式座標與曲線座標系統間方程之轉換，並在複雜網格外型下引入SCL條件來計算兩座標系統之間矩陣張量的項；第五章說明本文所採用的數值方法，動量方程之離散(時間以及空間)，以及一階偏導數與二階偏導數之緊緻格式；第六章推導壓力控制方程，並分別推導出在卡式與曲線座標下高階壓力方程之離散；第七章爲程式之驗證，包括了具理論解問題之驗證和標準問題之驗證，以證明方法的可靠性與準確性；第八章給定此一非線性系統的邊界條件以及合乎物理的環境參數，於平行流道及曲線流道內做計算，並觀察其物理行爲，以及模擬細胞膜離子通道內的傳輸行爲；第九章說明未來發展的目標與研究方向。



## 第二章

### 理論背景

#### 2.1 細胞結構之簡介

細胞是生物體構造及功能的基本單位，依照細胞組成數目的不同，又可區分為單細胞生物(如細菌、眼蟲)以及多細胞生物(如動物、植物)。而自然界之細胞又分成兩類，包括了原核細胞與真核細胞，原核生物缺少細胞核及膜狀的胞器，其個體微小，基本構造為細胞壁、細胞膜、細胞質、DNA，主要包含細菌及藍綠菌；真核生物具有細胞核及膜狀的胞器，基本構造為細胞膜、細胞核、細胞質，在細胞核中，有多條由DNA及蛋白質所組成線狀的染色體，主要包含原生生物界、菌物界、植物界及動物界。

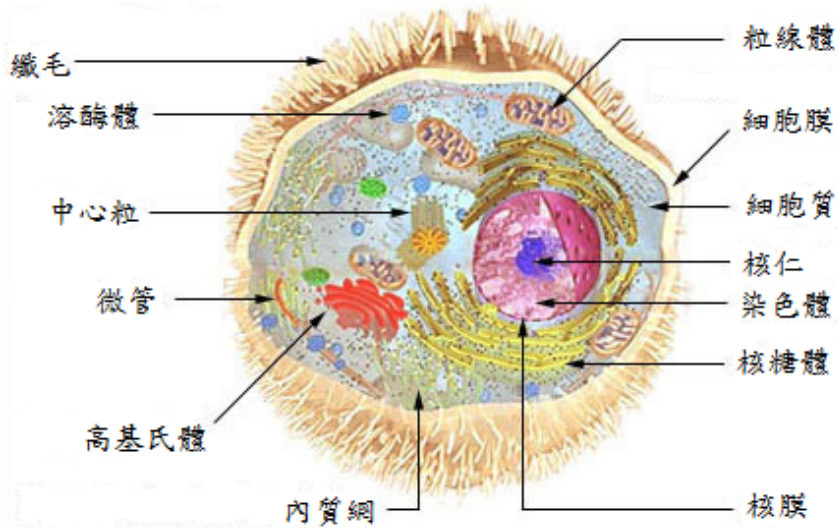


圖 2.1: 細胞結構之示意圖

([http://training.seer.cancer.gov/anatomy/cells\\_tissues\\_membranes/cells/structure.html](http://training.seer.cancer.gov/anatomy/cells_tissues_membranes/cells/structure.html))



## 2.2 細胞膜之簡介

細胞膜為細胞與環境之間以及胞器與細胞質之間的分界，是物質交換和信息傳遞的重要通道，主要是由雙層磷脂質、蛋白質以及醣類所組成。其中，雙層磷脂質(又稱脂雙層)排列成雙層結構，具有脂質的特性，可以讓脂溶性分子容易擴散通過；蛋白質鑲嵌於膜的內側、或貫穿脂雙層，種類多具有不同功能，有的能傳遞訊息，有的負責防禦(免疫系統)，而辨別和接收訊息作用的蛋白質稱為受體，這些受體接收外界訊息後可誘導細胞內發生相應的變化；醣類則附著於蛋白質上，含量少，可做為細胞間的辨識分子。

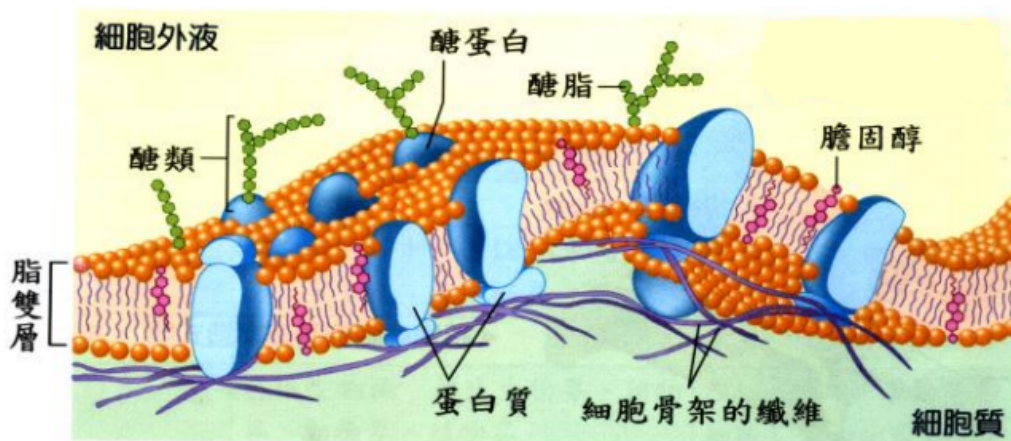


圖 2.2: 細胞膜結構之示意圖

([http://www.phyworld.idv.tw/BA\\_BIO/BOOK\\_1/htm/1-2\\_POINT.htm](http://www.phyworld.idv.tw/BA_BIO/BOOK_1/htm/1-2_POINT.htm))

## 2.3 離子通道之機制



離子通道是由蛋白質所構成，它們吸附並聚集在細胞膜上並形成孔隙，可讓物質進出細胞膜，以進行新陳代謝，這些孔隙即所謂的離子通道。離子通道又可分成三種類型，分別是電壓敏感、化學門控、機械敏感，其中電壓敏感指的是透過細胞膜上電位勢的改變來控制通道的開與關，像是 $K^+$ 、 $Na^+$ 、 $Ca^{2+}$ 、 $Cl^-$ 通道；化學門控是藉由神經遞質的結合和蛋白質上的受體分子來控制；機械敏感則是藉由細胞膜表面應力的改變來控制。控制離子通道開或關的機制有兩種，分別為門控(gating)，還有選擇性(selectivity)，比方說鈉離子比氯離子來的小，雖然鈉離子可以通過氯離子通道，但鈉離子還是只會通過鈉離子通道，並不會因為離子半徑小而通過其他通道，這就是所謂的選擇性(selectivity)。此外，離子通道有很多功能，包括調節血管上平滑肌的收縮、促進離子通過生物細胞膜的擴散、維持細胞膜上電位勢的平衡、以及維持細胞滲透壓使細胞保持功能的完整性。

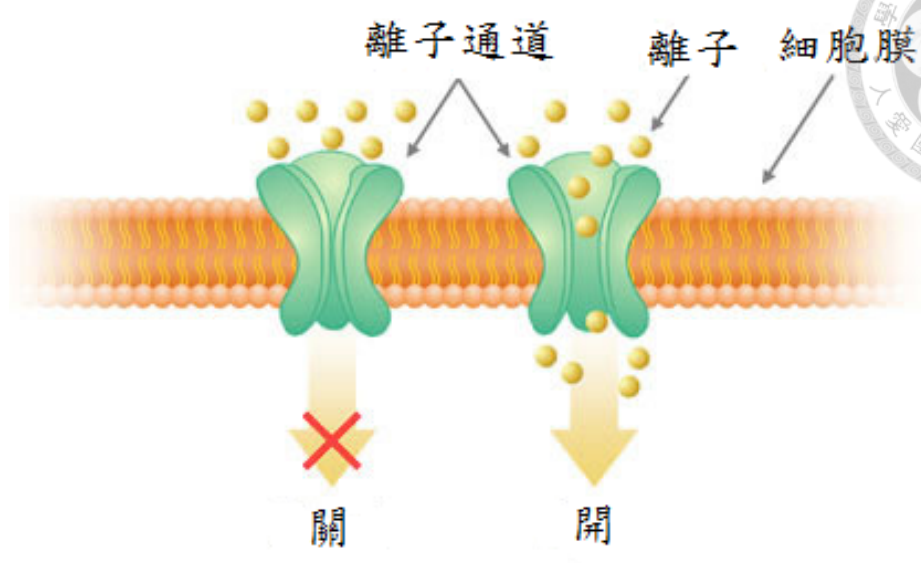


圖 2.3: 離子通道開與關之示意圖  
 (<http://www.algenis.com/technology/>)

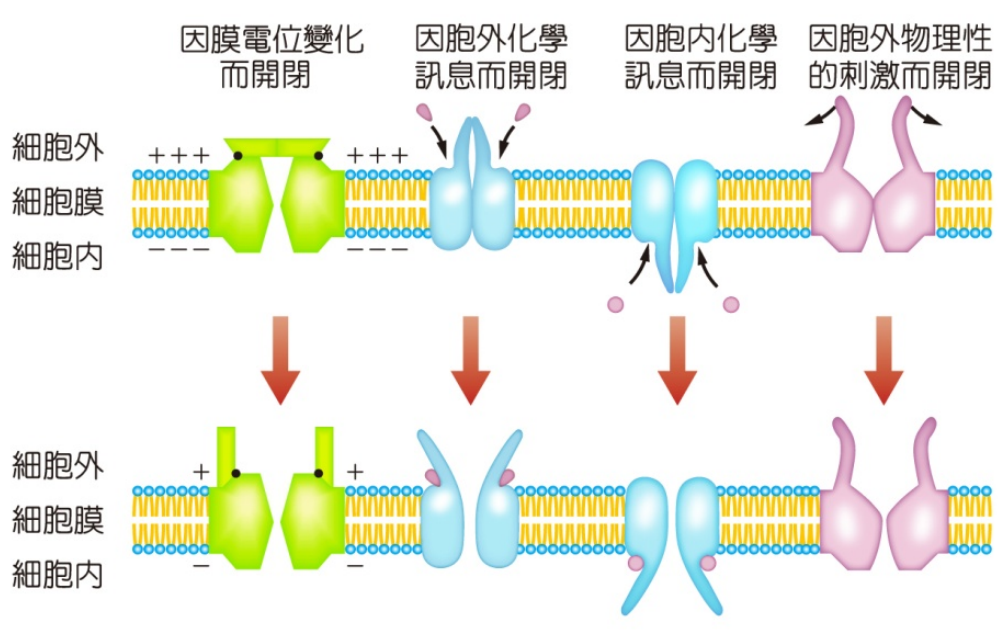


圖 2.4: 離子通道的種類  
 (<http://why276.weebly.com/38626233763689036947.html>)



## 2.4 電雙層之介紹

電雙層在電滲流的研究中，扮演著十分重要的角色；電雙層形成的主要原因是因為兩種物質間的電位不同，當極性溶液接觸到固體表面時，會產生離子化、即離子吸附及離子分離的現象。溶液中帶正電的溶質會受到管壁上負電荷的靜電吸引力而吸附在管壁表面，並形成固定層(stern layer)，此一固定層並不會受到外加電場的作用而移動；而會在離壁面稍遠處會有被靜電力所吸引的正電荷溶質，但吸附程度沒有固定層來的強，此層稱為擴散層(diffusive layer)，其吸附電荷數隨著遠離管壁的程度呈指數趨勢的急遽下降，在固定層及擴散層區間內即為所謂的電雙層(Electric double layer)。電雙層模型最早于1879年由Helmholtz提出，由于該模型過於簡單，並無法解釋許多的現象。在1910年，Gouy和Chapman修正了Helmholtz的模型，並提出離子呈現Boltzmann的分布。接著，在1998年Yang證明了當達到完全發展流或流速對離子的影響可以忽略時，離子呈現了Boltzmann分布 [9]；因此可以定義如下的離子濃度表示式：

$$n_+ = n_0 \exp\left(\frac{-ze\Psi}{k_b T}\right); n_- = n_0 \exp\left(\frac{+ze\Psi}{k_b T}\right) \quad (2.1)$$

其中 $n_{\pm}$ 為正、負離子濃度； $n_0$ 為溶液的總離子濃度(bulk concentration)； $T$ 為絕對溫度(單位為K)； $z$ 為離子價(Valence of ion)； $e$ 為單一電子的帶電量( $\equiv 1.60218 \times 10^{-9}C$ )； $k_b$ 為波茲曼常數( $k_b \equiv 1.38065 \times 10^{-23}J/K$ )。因此，在任一位置的體積電荷密度 $\rho_e$ 可表示成 [2]：

$$\rho_e = ze(n_+ - n_-) = -2zen_0 \sinh\left(\frac{ze\Psi}{k_b T}\right) \quad (2.2)$$

為了描述電位 $\Psi$ 與體積電荷和密度 $\rho_e$ 在平板間的電滲流動之關係，吾人可以使用下列的Poisson方程來描述之 [2]：

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} = \frac{\rho_e}{\epsilon\epsilon_0} \quad (2.3)$$

結合2.2和2.3兩式，即可得 [2]：

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} = \frac{-2zen_0}{\epsilon\epsilon_0} \sinh\left(\frac{ze\Psi}{k_b T}\right) \quad (2.4)$$



上式即為Poisson-Boltzmann方程式。定義Debye-Hückel參數(即擴散電雙層的特徵厚度 $\lambda_D$ (Debye length)的倒數)為 [2]

$$\kappa = \frac{1}{\lambda_D} = \left( \frac{2(ze)^2 n_0}{\epsilon \epsilon_0 k_B T} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.5)$$

若考慮的邊界條件如下：

$$y = 0 : \psi = \psi_0 \quad y = \infty : \psi = 0, \quad \frac{d\psi}{dy} = 0 \quad (2.6)$$

可推得：

$$\psi = \frac{2k_b T}{ze} \ln \left[ \frac{1 + \gamma e^{-\kappa y}}{1 - \gamma e^{-\kappa y}} \right] \quad (2.7)$$

其中 $\gamma = (e^{\frac{ze\psi_0}{2k_b T}} - 1) / (e^{\frac{ze\psi_0}{2k_b T}} + 1)$ 。當 $ze\psi_0 \ll 1$ 時，可以使用Debye-Hückel的近似方程 [3]

$$e^{\frac{ze\psi}{2k_b T}} \approx 1 + \frac{ze\psi}{2k_b T} \quad (2.8)$$

化簡2.7和2.8兩式，則平板電雙層的電位 $\psi$ 隨著與固體表面距離 $y$ 的關係式可表示成 [3]：

$$\psi = \psi_0 e^{-\kappa y} \quad (2.9)$$

其中 $\psi_0$ 為固體壁面之電位。

以上的描述即為Gouy-Chapman的電雙層模型，此模型並未考慮異性離子吸附於極板上的情況。爾後，Stern對Gouy-Chapman的模型做了修正，他將帶電層分成固定層及擴散層，其中固定層是由吸附於極板上的異性離子所形成，由於異性離子並不會均勻的吸附在極板上，因此Stern假設距壁面水力離子半徑處有一虛擬平面(Stern固定面)，即所謂的固定層。在固定層的表面電位，由 $\psi_d$ 所取代；固定層之外的擴散層，可以使用Gouy-Chapman的模型取代之，但是壁面電位 $\psi_0$ 以 $\psi_d$ 取代。在Stern層外，由於離子不均勻的分佈會產生凹、凸不平的平面，我們稱之為剪力面，在這個平面上的電位稱之為zeta電位 ( $\zeta_0$  Potential)；吾人合理的假設zeta電位應該略小於 $\psi_d$ ，當濃度不大時，可以假設 $\psi_d = \zeta_0$ ，本篇論文即採用此一假設。

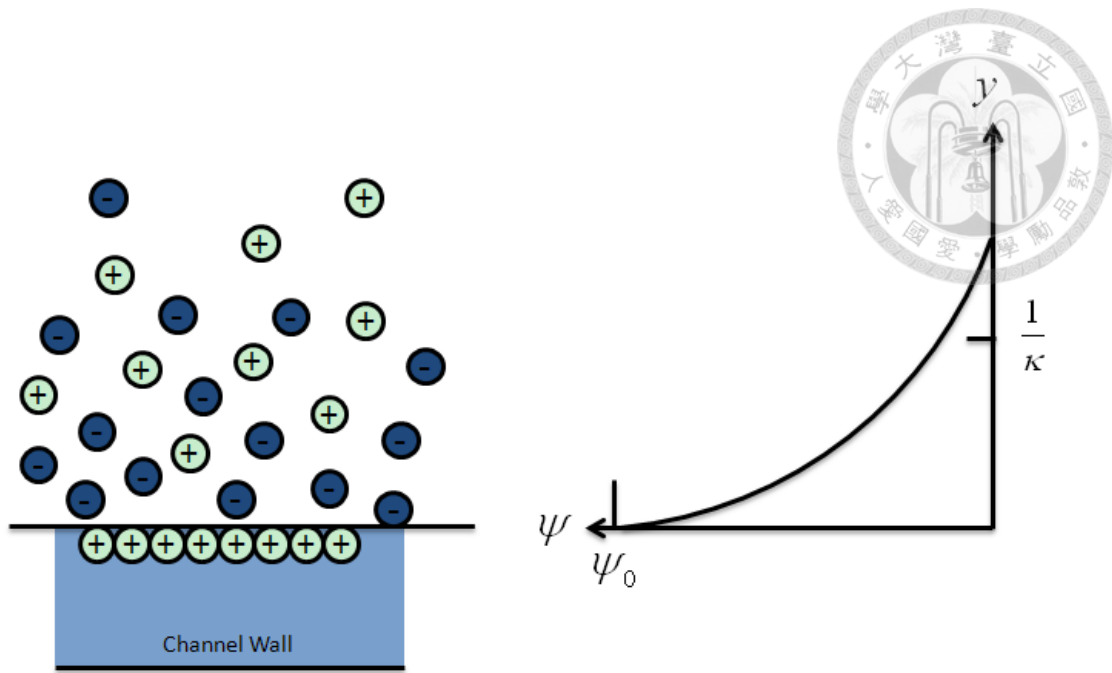


圖 2.5: Gouy-Chmapman 電雙層示之意圖

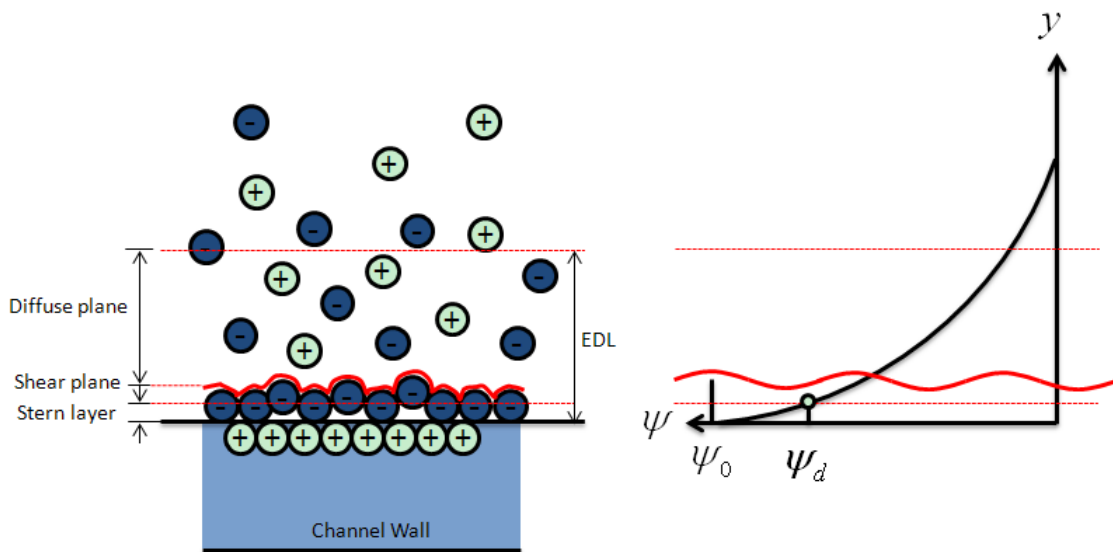


圖 2.6: Stern 電雙層之示意圖



## 2.5 電滲流現象

當在矽醇基的微管道中注入可解離的緩衝液時，由於壁面的矽醇基會開始水解(hydration  $\text{SiOH} \rightarrow \text{SiO}^- + \text{H}^+$ )，使得壁面帶有 $\text{SiO}^-$ 的負電，故可吸引正離子聚集在帶負電的壁面，也就是形成了所謂的電雙層(Electrical Double Layer, 簡稱EDL)。此時，若在微管道中加一電場，電場將驅動電雙層內的正離子往負極的方向移動，同時藉由黏滯力的作用，可帶動整個流體的運動，經由此一驅動方式所形成的流體運動稱之為電滲流(Electroosmotic Flow, 簡稱EOF)。

這種由電滲方式所驅動的流動和傳統由壓力所驅動的流動有所不同。傳統壓力驅動的流動在達到完全發展流時，在越靠近中心點的位置流速會越快，流體速度剖面呈現拋物線的形式，如圖2.8，拋物線的速度分佈會使流場產生渦漩(vorticity)而擾亂生醫檢測體帶寬的分佈，因此對於分離離子和控制流量都相當地不方便；然而由於電滲流在完全展開時，其速度剖面幾乎呈現瓶塞蓋狀均勻流的形式，如圖2.9所示，如此不但可以確保流道內幾乎每個位置的速度皆相同，流量也容易控制或是在控制離子分離也可達到相當的精確性，此一特性對於生醫的電泳分離技術是相當重要的。

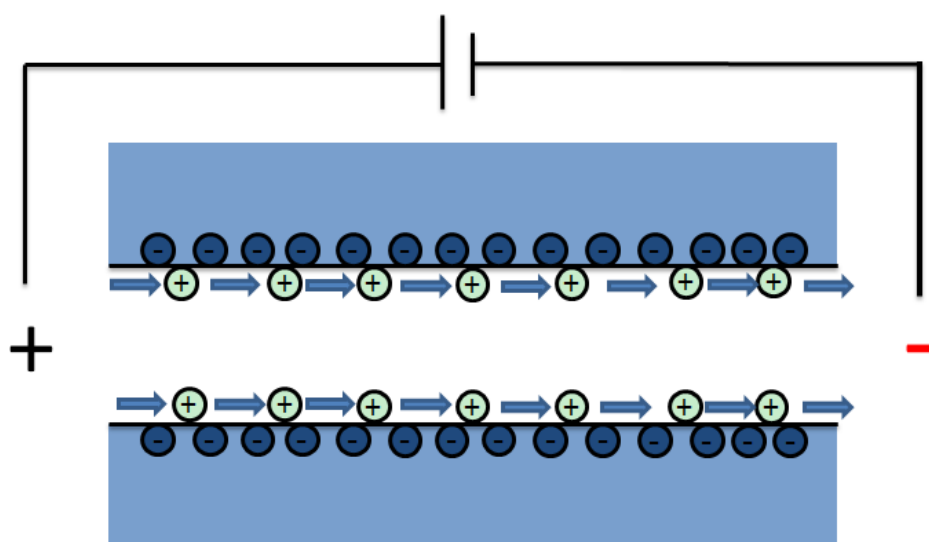


圖 2.7: 電滲流之示意圖

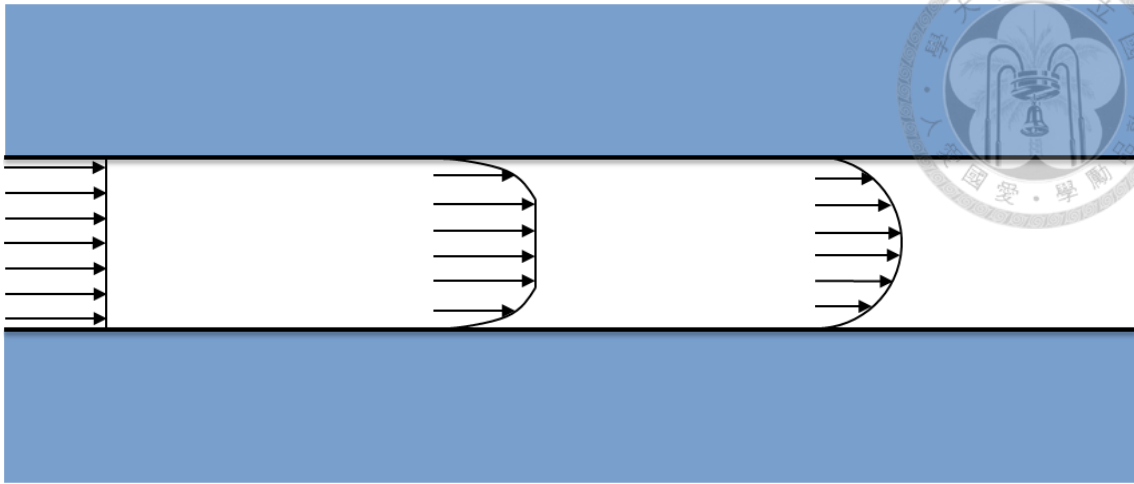


圖 2.8: 傳統壓力驅動流體至完全發展流的速度剖面之示意圖

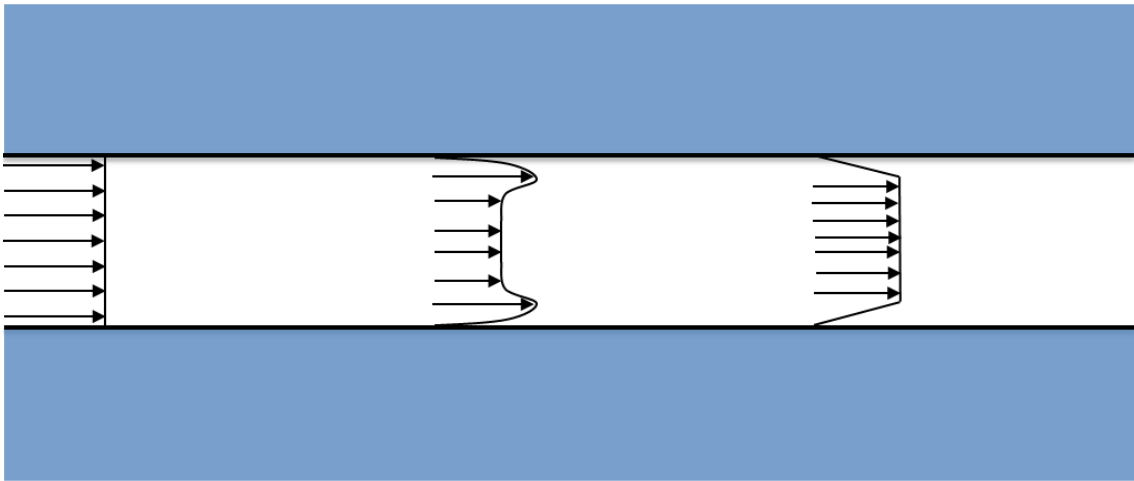


圖 2.9: 電滲流至完全發展流的速度剖面之示意圖



## 第三章

# 數學模型之建立

### 3.1 基本假設

電滲流之控制方程包含了 Navier-Stokes 以及 Poisson-Nernst-Planck 方程式。爲了描述其物理行爲，吾人建立了電滲流的物理模型，所涉及的假設之條件如下：

- 一．流場爲二維流動。
- 二．流體不具壓縮性。
- 三．忽略浮力及重力效應。
- 四．忽略焦耳熱效應。
- 五．忽略磁場效應( $\nabla \times \underline{E} = 0$ )。
- 六．流體處於等溫絕熱。
- 七．濃度不影響流體的物理性質
- 八．將正、負離子的擴散係數  $D_i, i = +, -$  視爲常數且  $D_+ = D_-$ 。
- 九．相對介電係數  $\epsilon$ 、導電率  $\sigma$  視爲常數。



## 3.2 統御方程式

### 3.2.1 描述外加電場電位勢之Laplace方程式

電滲流有別於一般傳統壓力所驅動的流動，它是在流道兩端附加一電場以驅動流體運動；描述外加電場的電位勢( $\phi$ )可以由下列的Laplace方程來表示：

$$\nabla \cdot (\sigma(T) \nabla \phi) = 0 \quad (3.1)$$

其中 $\sigma$ 為電導率。導電率只隨溫度變化，因此根據3.1節的假設( $T=\text{constant}$ )，(3.1)式可以簡化成

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (3.2)$$

上式即作為在本篇論文中用以描述外加電場的Laplace方程式。

### 3.2.2 描述壁面電位勢之Poisson方程式

由於緩衝溶液中的離子通過微管道時將受到壁面所帶電荷的吸引，會在管壁上形成電雙層(EDL)；因此微流道壁面所產生的電位勢( $\psi$ )與溶液中的靜電荷密度( $\rho_e$ )的關係，可由下列的Poisson方程式來表示(SI單位)：

$$\nabla^2 \psi = -\frac{\rho_e}{\epsilon \epsilon_0} \quad (3.3)$$

其中 $\epsilon_0 (\equiv 8.854 \times 10^{-12} \text{C/Vm})$ 為真空中的介電常數(dielectric constant)； $\epsilon$ 為相對介電係數且為溫度的函數，本模型假設溫度為常數。在上式等號右邊的源項中， $\rho_e$ 代表流道中的體積靜電荷密度，它可以寫成：

$$\rho_e = ze(n_+ - n_-) \quad (3.4)$$

其中 $n_{\pm}$ 為正、負離子濃度； $z$ 為離子價數(Valence of ion)； $e$ 為單一電子的帶電量( $\equiv 1.60218 \times 10^{-9} \text{C}$ )；



### 3.2.3 描述正負離子分佈之Nernst-Planck方程式

傳統由壓力所驅動的流場，通常僅由對流和擴散的效應所決之，由於電滲流模型是利用外加電場來驅動管道內離子流動，因此在分析電滲現象時，必須加入離子遷移的效應，才能完整的描述其物理現象；而Nernst-Planck方程式即是用來描述離子的受力情形，離子通量 $\vec{j}$ 的表示式如下 [2]：

$$\vec{j} = n_i \vec{u} - D_i \nabla n_i - \left[ \frac{z_i e}{k_b T} D_i n_i \nabla (\phi + \psi) \right] \quad (3.5)$$

$n_i$  (i=+,-)為正、負離子濃度(bulk concentration)， $D_i$  (i=+,-)為正、負離子的擴散係數， $\vec{u}$ 為流場速度， $-\nabla\phi$ 為外加電場， $-\nabla\psi$ 為壁面電位的電位勢， $z_i$ 為離子價數(Valence of ion)。式(3.5)等號右邊的第一項代表離子因流動所產生的影響，第二項代表離子在溶液中的擴散情形，第三項代表離子遷移的效應。由於系統內的離子通量守恆，故可以得到下列的方程式 [2]：

$$\nabla \cdot \vec{j} = \nabla \cdot \left[ n_i \vec{u} - D_i \nabla n_i - \frac{z_i e}{k_b T} D_i n_i \nabla (\phi + \psi) \right] \quad (3.6)$$

基於溫度為定值(T= constant)，正、負離子擴散係數相等且為常數( $D_+ = D_- = \text{constant}$ )，故可將離子守恆方程式寫成如下 [2]:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (n_i \vec{u}) - D_i \nabla^2 n_i - \frac{z_i e}{k_b T} D_i \nabla \cdot [n_i \nabla (\phi + \psi)] = 0 \quad (3.7)$$

上式即為Nernst-Planck 方程式。

### 3.2.4 不可壓縮黏性流之Navier-Stokes方程式

電滲流與傳統一般由壓力所驅動的流體流動之間的最大不同是電滲流並非完全由管道兩端之壓力來驅動流體，而是由外加電場來推動電雙層內的離子移動及管內流體的流動，因此在考慮Navier-Stokes方程時，必須有所修正。連續方程、動量方程可表示為

◆連續方程:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (3.8)$$

◆動量方程:

$$\rho\left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u}\right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u} + \rho_e \vec{E} \quad (3.9)$$

其中 $\vec{u}$ 為速度向量； $t$ 為時間； $p$ 為壓力； $\mu$ 為靜黏滯係數； $\rho_e$ 為電荷密度； $\vec{E}$ 為電場強度；電荷密度 $\rho_e$ 的定義為 [2]：

$$\rho_e = ze(n_+ - n_-) \quad (3.10)$$

電場強度 $\vec{E}$ 的定義為 [2]：

$$\vec{E} \equiv -\nabla(\phi + \psi) \quad (3.11)$$

結合(3.10)、(3.9)和(3.11)，Navier-Stokes 可表示成：

$$\rho\left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u}\right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u} + ze(n_- - n_+) \nabla(\phi + \psi) \quad (3.12)$$



## 第四章

### 座標轉換方程

爲了在不規則外型的物理域上做計算，吾人必須做座標轉換，即將物理域 $(x,y)$ 上的每一點做一對一的映射，映射到均勻且正交的計算域 $(\xi,\eta)$ 上，以下將先描述兩座標間之轉換關係式，接著再運用這些關係式，代入在卡式座標上無因次之Electrohydrodynamics方程組，以推導出曲線座標上描述電滲流物理行爲的統御方程式。以下爲卡式與曲線座標系統間之轉換關係式：

$$J = x_{\xi}y_{\eta} - x_{\eta}y_{\xi}$$

$$y_{\xi} = -J\eta_x$$

$$y_{\eta} = J\xi_x$$

$$x_{\xi} = J\eta_y$$

$$x_{\eta} = -J\xi_y$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{y_{\eta}}{J} \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{y_{\xi}}{J} \frac{\partial}{\partial \eta}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = -\frac{x_{\eta}}{J} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{x_{\xi}}{J} \frac{\partial}{\partial \eta}$$



## 4.1 於卡式座標上無因次之Electrohydrodynamics方程組

爲了描述電滲流的物理行爲，吾人引入了 Navier-Stokes(NS)方程組和 Poisson-Nernst-Planck(PNP)方程組，並組成了一個電、流耦合的非線性動力系統，其方程組可以表示成 [2]：

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (4.1)$$

$$\nabla^2 \psi = -\frac{ze}{\epsilon\epsilon_0}(n_+ - n_-) \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial n_+}{\partial t} + \nabla \cdot (n_+ \underline{u}) - D_+ \nabla^2 n_+ - \frac{z_+ e}{k_b T} D_+ \nabla \cdot [n_+ \nabla(\phi + \psi)] = 0 \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial n_-}{\partial t} + \nabla \cdot (n_- \underline{u}) - D_- \nabla^2 n_- - \frac{z_- e}{k_b T} D_- \nabla \cdot [n_- \nabla(\phi + \psi)] = 0 \quad (4.4)$$

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0 \quad (4.5)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla \underline{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \underline{u} + ze(n_- - n_+) \nabla(\phi + \psi) \quad (4.6)$$

本文採用下列的無因次參數以期將因次方程式(4.1 - 4.6)改寫成等價的無因次方程組 [6]：

$$\hat{x} = \frac{x}{H}, \hat{y} = \frac{y}{H}, \hat{t} = \frac{t U_{ref}}{H}, \hat{\phi} = \frac{ze\phi}{k_b T_{ref}}, \hat{\psi} = \frac{ze\psi}{k_b T_{ref}} \quad (4.7)$$

$$\hat{n}_+ = \frac{n_+}{n_0}, \hat{n}_- = \frac{n_-}{n_0}, \hat{u} = \frac{u}{U_{ref}}, \hat{v} = \frac{v}{U_{ref}}, \hat{p} = \frac{\Delta p}{\rho U_{ref}^2} \quad (4.8)$$

其中  $u$  和  $v$  分別代表在  $x$  和  $y$  方向的流體速度； $T_{ref}$  爲參考溫度； $U_{ref}$  爲特徵速度 (定義爲  $U_{ref} = -\frac{\epsilon\epsilon_0 \zeta E_x}{\mu}$  [1])， $\zeta$  爲給定之壁面電位。利用上述所列的無因次參數，式(4.1)、(4.2)、(4.3)、(4.4)、(4.5)、(4.6)可以改寫成下列的無因次方程組 [6]，即：



$$\hat{\nabla}^2 \hat{\phi} = 0 \quad (4.9)$$

$$\hat{\nabla}^2 \hat{\psi} = -\frac{(\kappa H)^2}{2} (n_+ - n_-) \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial n_+}{\partial \hat{t}} + \hat{\nabla} \cdot (n_+ \hat{u}) - \frac{1}{ScRe} \hat{\nabla}^2 n_+ - \frac{1}{ScRe} \hat{\nabla} \cdot [n_+ \hat{\nabla} (\hat{\phi} + \hat{\psi})] = 0 \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial n_-}{\partial \hat{t}} + \hat{\nabla} \cdot (n_- \hat{u}) - \frac{1}{ScRe} \hat{\nabla}^2 n_- + \frac{1}{ScRe} \hat{\nabla} \cdot [n_- \hat{\nabla} (\hat{\phi} + \hat{\psi})] = 0 \quad (4.12)$$

$$\hat{\nabla} \cdot \hat{u} = 0 \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{t}} + \hat{u} \cdot \hat{\nabla} \hat{u} = -\hat{\nabla} \hat{p} + \frac{1}{Re} \hat{\nabla}^2 \hat{u} + Gx(n_- - n_+) \hat{\nabla} (\hat{\phi} + \hat{\psi}) \quad (4.14)$$

其中 Schmidt number 定義為  $Sc = \frac{\mu}{\rho D}$ 、Reynolds number 定義為  $Re = \frac{\rho H U_{ref}}{\mu}$ 、Debye length 的倒數為  $\kappa = \frac{1}{\lambda_D} = \left[ \frac{2n_0(z_e)^2}{\epsilon \epsilon_0 k_b T_{ref}} \right]^{\frac{1}{2}}$ ，以及  $Gx = \frac{k_b T_{ref} n_0}{\rho U_{ref}^2}$  [6]。上述之式即為電滲流物理模型在卡式座標下本文所採用的無因次化方程組。



## 4.2 於曲線座標上無因次之Electrohydrodynamics方程組

爲了捕捉於電雙層內的細緻物理現象，如果在卡式座標下進行計算，網格數勢必大幅的增加，如果物理域爲不規則形狀，吾人必須要將方程做一對一的映射，並將不規則的物理域轉換到均勻且正交的網格上做計算，因此必須將所採用之無因次方程組從卡式座標 $(x,y)$ 轉換到曲線座標 $(\xi,\eta)$ ；將前述所推導出的無因次化方程組(4.9 - 4.14) 中的省略符號，可表示成如下之方程：

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (4.15)$$

$$\nabla^2 \psi = -\frac{(\kappa H)^2}{2}(n_+ - n_-) \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial n_+}{\partial t} + \nabla \cdot (n_+ \underline{u}) - \frac{1}{ScRe} \nabla^2 n_+ - \frac{1}{ScRe} \nabla \cdot [n_+ \nabla(\phi + \psi)] = 0 \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial n_-}{\partial t} + \nabla \cdot (n_- \underline{u}) - \frac{1}{ScRe} \nabla^2 n_- + \frac{1}{ScRe} \nabla \cdot [n_- \nabla(\phi + \psi)] = 0 \quad (4.18)$$

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0 \quad (4.19)$$

$$\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla \underline{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \underline{u} + Gx(n_- - n_+) \nabla(\phi + \psi) \quad (4.20)$$

轉換到曲線座標 $(\xi,\eta)$ 下的無因次化方程組爲：

$$\begin{aligned} & (\alpha \phi_{\xi\xi} - 2\beta \phi_{\xi\eta} + \gamma \phi_{\eta\eta}) / |J|^2 \\ & + [(\alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta})(y_{\xi} \phi_{\eta} - y_{\eta} \phi_{\xi}) \\ & + (\alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta})(x_{\eta} \phi_{\xi} - x_{\xi} \phi_{\eta})] / |J|^3 = 0 \end{aligned} \quad (4.21)$$



$$\begin{aligned}
& (\alpha\psi_{\xi\xi} - 2\beta\psi_{\xi\eta} + \gamma\psi_{\eta\eta})/|J|^2 \\
& + [(\alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta})(y_{\xi}\psi_{\eta} - y_{\eta}\psi_{\xi}) \\
& + (\alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta})(x_{\eta}\psi_{\xi} - x_{\xi}\psi_{\eta})]/|J|^3 \\
& = -\frac{(\kappa H)^2}{2}(n_+ - n_-)
\end{aligned} \tag{4.22}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial n_+}{\partial t} + (u\xi_x + v\xi_y)\frac{\partial n_+}{\partial \xi} + (u\eta_x + v\eta_y)\frac{\partial n_+}{\partial \eta} \\
& = \frac{1}{ScRe}\nabla^2 n_+ \\
& + \frac{1}{ScRe}[(\xi_x\frac{\partial n_+}{\partial \xi} + \eta_x\frac{\partial n_+}{\partial \eta})(\xi_x\frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \eta_x\frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \xi_x\frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \eta_x\frac{\partial \phi}{\partial \eta}) \\
& (\xi_y\frac{\partial n_+}{\partial \xi} + \eta_y\frac{\partial n_+}{\partial \eta})(\xi_y\frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \eta_y\frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \xi_y\frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \eta_y\frac{\partial \phi}{\partial \eta}) + n_+\nabla^2(\psi + \phi)]
\end{aligned} \tag{4.23}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial n_-}{\partial t} + (u\xi_x + v\xi_y)\frac{\partial n_-}{\partial \xi} + (u\eta_x + v\eta_y)\frac{\partial n_-}{\partial \eta} \\
& = \frac{1}{ScRe}\nabla^2 n_- \\
& - \frac{1}{ScRe}[(\xi_x\frac{\partial n_-}{\partial \xi} + \eta_x\frac{\partial n_-}{\partial \eta})(\xi_x\frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \eta_x\frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \xi_x\frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \eta_x\frac{\partial \phi}{\partial \eta}) \\
& (\xi_y\frac{\partial n_-}{\partial \xi} + \eta_y\frac{\partial n_-}{\partial \eta})(\xi_y\frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \eta_y\frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \xi_y\frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \eta_y\frac{\partial \phi}{\partial \eta}) + n_-\nabla^2(\psi + \phi)]
\end{aligned} \tag{4.24}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial u}{\partial t} + (u\xi_x + v\xi_y)\frac{\partial u}{\partial \xi} + (u\eta_x + v\eta_y)\frac{\partial u}{\partial \eta} \\
& = -(\xi_x\frac{\partial p}{\partial \xi} + \eta_x\frac{\partial p}{\partial \eta}) + \frac{1}{Re}\nabla^2 u \\
& + \frac{n_0 e \zeta_0}{\rho U_0^2}(n_- - n_+)(\xi_x\frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \eta_x\frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \xi_x\frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \eta_x\frac{\partial \phi}{\partial \eta})
\end{aligned} \tag{4.25}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial v}{\partial t} + (u\xi_x + v\xi_y)\frac{\partial v}{\partial \xi} + (u\eta_x + v\eta_y)\frac{\partial v}{\partial \eta} \\
& = -(\xi_y\frac{\partial p}{\partial \xi} + \eta_y\frac{\partial p}{\partial \eta}) + \frac{1}{Re}\nabla^2 v \\
& + \frac{n_0 e \zeta_0}{\rho U_0^2}(n_- - n_+)(\xi_y\frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \eta_y\frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \xi_y\frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \eta_y\frac{\partial \phi}{\partial \eta})
\end{aligned} \tag{4.26}$$

其中(4.25)和(4.26)為直接對(4.20)做從 $(x, y)$ 座標轉換成 $(\xi, \eta)$ 之形式的推導，其物理量還是原本在 $(x, y)$ 座標上的 $u$ 和 $v$ ，所以必須將其轉換成在 $(\xi, \eta)$ 座標上之以逆變(contravariant)速度分量 $U(u\xi_x + v\xi_y)$ 和 $V(u\eta_x + v\eta_y)$ 以重寫方程式，結果如下所示：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho J\phi) + \frac{\partial}{\partial \xi}(\rho J U\phi) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\rho J V\phi) = -p^\phi + \frac{\partial}{\partial \xi}(\Gamma^\phi J g^{11} \frac{\partial \phi}{\partial \xi}) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\Gamma^\phi J g^{22} \frac{\partial \phi}{\partial \eta}) + S_1^\phi + S_2^\phi + S_3^\phi \quad (4.27)$$

其中各項的整理如附錄A所示。

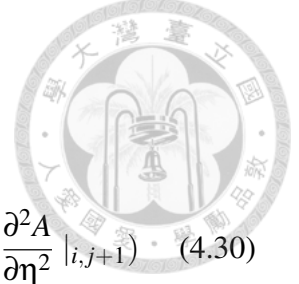
### 4.3 座標轉換矩陣之計算 - 滿足SCL性質之矩陣張量項之推導

當物理域呈不規則形狀時，在執行計算時勢必將其轉換到計算域上做計算，也就是從 $(x, y)$ 座標系統轉換成 $(\xi, \eta)$ 座標系統，而兩系統之間的轉換存在著以下之關係式： $x_\xi = J\eta_y$ ,  $y_\xi = -J\eta_x$ ,  $x_\eta = -J\xi_y$  和  $y_\eta = J\xi_x$ ，且它們之間會自動滿足以下的兩條方程式：

$$(J\xi_x)_\xi + (J\eta_x)_\eta = 0, \quad (4.28)$$

$$(J\xi_y)_\xi + (J\eta_y)_\eta = 0. \quad (4.29)$$

(4.28)和(4.29)兩式在連續的情況下理論上會自動地滿足，又稱為空間守恆律(Space Conservation Law)。在此，吾人將推導在SCL條件限制下，以CCD [21]來近似矩陣張量和Jacobian( $J$ )。令 $y_\xi = A$ ,  $y_\eta = B$ ,  $x_\xi = C$ ,  $x_\eta = D$ ，而 $A_\eta$ ,  $B_\xi$ ,  $C_\eta$  及  $D_\xi$ 之緊緻格式分別如下：



$$\begin{aligned}
& a_1 \frac{\partial A}{\partial \eta} |_{i,j-1} + \frac{\partial A}{\partial \eta} |_{ij} + a_3 \frac{\partial A}{\partial \eta} |_{i,j+1} \\
&= \frac{1}{h} (c_1 A_{i,j-1} + c_2 A_{ij} + c_3 A_{i,j+1}) - h (b_1 \frac{\partial^2 A}{\partial \eta^2} |_{i,j-1} + b_2 \frac{\partial^2 A}{\partial \eta^2} |_{ij} + b_3 \frac{\partial^2 A}{\partial \eta^2} |_{i,j+1}) \quad (4.30)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \tilde{a}_1 \frac{\partial B}{\partial \xi} |_{i-1,j} + \frac{\partial B}{\partial \xi} |_{ij} + \tilde{a}_3 \frac{\partial B}{\partial \xi} |_{i+1,j} \\
&= \frac{1}{h} (\tilde{c}_1 B_{i-1,j} + \tilde{c}_2 B_{ij} + \tilde{c}_3 B_{i+1,j}) - h (\tilde{b}_1 \frac{\partial^2 B}{\partial \xi^2} |_{i-1,j} + \tilde{b}_2 \frac{\partial^2 B}{\partial \xi^2} |_{ij} + \tilde{b}_3 \frac{\partial^2 B}{\partial \xi^2} |_{i+1,j}) \quad (4.31)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& p_1 \frac{\partial C}{\partial \eta} |_{i,j-1} + \frac{\partial C}{\partial \eta} |_{ij} + p_3 \frac{\partial C}{\partial \eta} |_{i,j+1} \\
&= \frac{1}{h} (r_1 C_{i,j-1} + r_2 C_{ij} + r_3 C_{i,j+1}) - h (q_1 \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} |_{i,j-1} + q_2 \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} |_{ij} + q_3 \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} |_{i,j+1}) \quad (4.32)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \tilde{p}_1 \frac{\partial D}{\partial \xi} |_{i-1,j} + \frac{\partial D}{\partial \xi} |_{ij} + \tilde{p}_3 \frac{\partial D}{\partial \xi} |_{i+1,j} \\
&= \frac{1}{h} (\tilde{r}_1 D_{i-1,j} + \tilde{r}_2 D_{ij} + \tilde{r}_3 D_{i+1,j}) - h (\tilde{q}_1 \frac{\partial^2 D}{\partial \xi^2} |_{i-1,j} + \tilde{q}_2 \frac{\partial^2 D}{\partial \xi^2} |_{ij} + \tilde{q}_3 \frac{\partial^2 D}{\partial \xi^2} |_{i+1,j}) \quad (4.33)
\end{aligned}$$

以下將推導式(4.32)中之權重係數，其他三條方程之權重係數之推導可同理推得。

將(4.32)式減去(4.33)式，我們可以得到SCL條件中的第二條關係式  $(-x_\eta)_\xi + (x_\xi)_\eta = 0$ ，也就是  $-D_\xi + C_\eta = 0$

$$\begin{aligned}
& (-p_1 \frac{\partial C}{\partial \eta} |_{i,j-1} - p_3 \frac{\partial C}{\partial \eta} |_{i,j+1}) + \frac{1}{h} (r_1 C_{i,j-1} + r_2 C_{ij} + r_3 C_{i,j+1}) \\
& - h (q_1 \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} |_{i,j-1} + q_2 \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} |_{ij} + q_3 \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} |_{i,j+1}) - \frac{\partial D}{\partial \xi} |_{ij} = 0. \quad (4.34)
\end{aligned}$$

接著，在(4.34)式等號兩邊同時乘上 $h$ ，可以得到如下 $C_{ij}$ 之表示式

$$\begin{aligned}
C_{ij} &= h (p_1^{new} \frac{\partial C}{\partial \eta} |_{i,j-1} + p_3^{new} \frac{\partial C}{\partial \eta} |_{i,j+1}) - (r_1^{new} C_{i,j-1} + r_3^{new} C_{i,j+1}) \\
& + h^2 (q_1^{new} \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} |_{i,j-1} + q_2^{new} \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} |_{ij} + q_3^{new} \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} |_{i,j+1}) + p_2^{new} h \frac{\partial D}{\partial \xi} |_{ij}. \quad (4.35)
\end{aligned}$$

其中， $\frac{p_1}{r_2} = p_1^{new}$ ， $\frac{p_3}{r_2} = p_3^{new}$ ， $\frac{r_1}{r_2} = r_1^{new}$ ， $\frac{r_3}{r_2} = r_3^{new}$ ， $\frac{q_1}{r_2} = q_1^{new}$ ， $\frac{q_2}{r_2} = q_2^{new}$ ， $\frac{q_3}{r_2} = q_3^{new}$  和  $\frac{1}{r_2} = p_2^{new}$ 。



而偏導數項 $C(\equiv x_\xi)$ 在三點緊緻架構下之形式為

$$\begin{aligned} & a_1 C_{i-1,j} + C_{ij} + a_3 C_{i+1,j} \\ &= \frac{1}{h}(c_1 x_{i-1,j} + c_2 x_{ij} + c_3 x_{i+1,j}) - h(b_1 \frac{\partial C}{\partial \xi} |_{i-1,j} + b_2 \frac{\partial C}{\partial \xi} |_{ij} + b_3 \frac{\partial C}{\partial \xi} |_{i+1,j}) \end{aligned} \quad (4.36)$$

根據 [21]所推導出來的係數，將 $a_1, a_3, b_1, b_2, b_3, c_1, c_2$  及  $c_3$ 代入(4.36)，可得

$$\begin{aligned} & \frac{7}{16} C_{i-1,j} + C_{ij} + \frac{7}{16} C_{i+1,j} \\ &= \frac{1}{h}(-\frac{15}{16} x_{i-1,j} + \frac{15}{16} x_{i+1,j}) - h(\frac{1}{16} \frac{\partial C}{\partial \xi} |_{i-1,j} - \frac{1}{16} \frac{\partial C}{\partial \xi} |_{i+1,j}) \end{aligned} \quad (4.37)$$

接著，將(4.35)式代入(4.37)式， $x_\xi$ 在SCL條件限制下之緊緻格式為

$$\begin{aligned} & \frac{7}{16} C_{i-1,j} + \frac{7}{16} C_{i+1,j} \\ &= \frac{1}{h}(-\frac{15}{16} x_{i-1,j} + \frac{15}{16} x_{i+1,j}) - h(\frac{1}{16} \frac{\partial C}{\partial \xi} |_{i-1,j} - \frac{1}{16} \frac{\partial C}{\partial \xi} |_{i+1,j}) \\ & - h(p_1^{new} \frac{\partial C}{\partial \eta} |_{i,j-1} + p_2^{new} \frac{\partial D}{\partial \xi} |_{ij} + p_3^{new} \frac{\partial C}{\partial \eta} |_{i,j+1}) + (r_1^{new} C_{i,j-1} + r_3^{new} C_{i,j+1}) \\ & - h^2(q_1^{new} \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} |_{i,j-1} + q_2^{new} \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} |_{ij} + q_3^{new} \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} |_{i,j+1}) \end{aligned} \quad (4.38)$$

藉由消去模型方程(modified equation)中最大的誤差項，可以得到以下的代數方程組

$$-r_1^{new} - r_3^{new} - 1 = 0 \quad (4.39)$$

$$p_1^{new} + p_2^{new} + p_3^{new} + r_1^{new} - r_3^{new} = 0 \quad (4.40)$$

$$-p_1^{new} + p_3^{new} + q_1^{new} + q_2^{new} + q_3^{new} - \frac{1}{2} r_1^{new} - \frac{1}{2} r_3^{new} = 0 \quad (4.41)$$

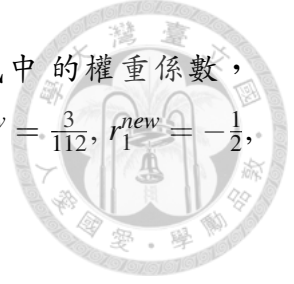
$$\frac{1}{2} p_1^{new} + \frac{1}{2} p_3^{new} - q_1^{new} + q_3^{new} + \frac{1}{6} r_1^{new} - \frac{1}{6} r_3^{new} = 0 \quad (4.42)$$

$$-\frac{1}{6} p_1^{new} + \frac{1}{6} p_3^{new} + \frac{1}{2} q_1^{new} + \frac{1}{2} q_3^{new} - \frac{1}{24} r_1^{new} - \frac{1}{24} r_3^{new} = 0 \quad (4.43)$$

$$\frac{1}{24} p_1^{new} + \frac{1}{24} p_3^{new} - \frac{1}{6} q_1^{new} + \frac{1}{6} q_3^{new} + \frac{1}{120} r_1^{new} - \frac{1}{120} r_3^{new} = 0 \quad (4.44)$$

$$-\frac{1}{120} p_1^{new} + \frac{1}{120} p_3^{new} + \frac{1}{24} q_1^{new} + \frac{1}{24} q_3^{new} - \frac{1}{720} r_1^{new} - \frac{1}{720} r_3^{new} - \frac{1}{5040} = 0 \quad (4.45)$$

$$\frac{1}{720} p_1^{new} + \frac{1}{720} p_3^{new} - \frac{1}{120} q_1^{new} + \frac{1}{120} q_3^{new} + \frac{1}{5040} r_1^{new} - \frac{1}{5040} r_3^{new} = 0 \quad (4.46)$$



透過求解上述之聯立方程(4.39)-(4.46)，可以推導出於(4.38)式中的權重係數，即  $p_1^{new} = \frac{23}{112}$ ,  $p_2^{new} = 0$ ,  $p_3^{new} = -\frac{23}{112}$ ,  $q_1^{new} = \frac{3}{112}$ ,  $q_2^{new} = -\frac{1}{7}$ ,  $q_3^{new} = \frac{3}{112}$ ,  $r_1^{new} = -\frac{1}{2}$ ,  $r_3^{new} = -\frac{1}{2}$ .

## 4.4 數值驗證

前面已推導了使用結合緊緻差分法(combined compact difference)，並引入空間守恆律(space conservation law)來計算卡式與曲線座標間之矩陣張量項，在此，吾人將在物理域分別為簡單和複雜的情況下，做矩陣張量項的驗證。

### 4.4.1 簡單外形之網格

在此，所測試之網格的形狀為扇形，其卡式座標( $x, y$ )與曲線座標( $\xi, \eta$ )之關係式為

$$\begin{aligned}x &= (0.3 + 0.7\eta)\cos(0.5\pi\xi) \\y &= (0.3 + 0.7\eta)\sin(0.5\pi\xi)\end{aligned}\tag{4.47}$$

其中，( $0 \leq \xi, \eta \leq 1$ )。由上述關係式，我們可以得到兩座標系統間矩陣張量項的實解，其計算後的結果與實解之誤差將與二階傳統中央差分及原始CCD做一比較，如表4.1所示。

### 4.4.2 複雜外形之網格



在此，所測試之網格的形狀為波浪狀的不規則形狀，其卡式座標 $(x, y)$ 與曲線座標 $(\xi, \eta)$ 之間的關係式為

$$\begin{aligned} x &= \frac{(Nx - 1)\xi + 5.0\sin[0.05\pi(Ny - 1)\eta]}{50} \\ y &= \frac{(Ny - 1)\eta + 5.0\sin[0.05\pi(Nx - 1)\xi]}{50} \end{aligned} \quad (4.48)$$

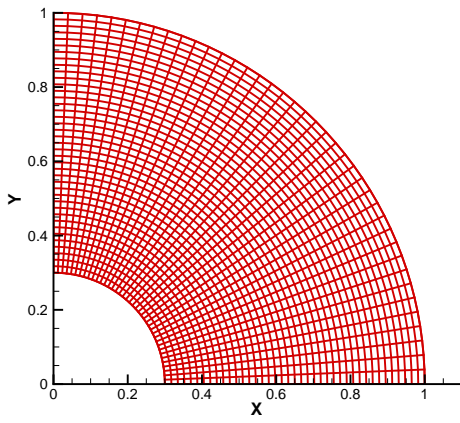
其中， $(0 \leq \xi, \eta \leq 1)$ ，具吾人選用 $Nx = Ny = 81$ 。由上述關係式，我們可以得到兩座標系統間矩陣張量項的實解，計算的結果與實解之誤差將與二階傳統中央差分及原始CCD做一比較，如表4.2所示。

	傳統二階中央差分	原始CCD	SCL-CCD
$x_\xi$	$2.08495 \times 10^{-4}$	$5.03683 \times 10^{-8}$	$5.03683 \times 10^{-8}$
$y_\xi$	$2.08495 \times 10^{-4}$	$5.03683 \times 10^{-8}$	$5.03683 \times 10^{-8}$
$x_{\xi\xi}$	$4.00357 \times 10^{-4}$	$8.83915 \times 10^{-6}$	$8.83916 \times 10^{-6}$
$y_{\xi\xi}$	$4.00357 \times 10^{-4}$	$8.83915 \times 10^{-6}$	$8.83916 \times 10^{-6}$
$x_{\xi\eta}$	$2.13940 \times 10^{-4}$	$5.16837 \times 10^{-8}$	$2.33679 \times 10^{-7}$
$y_{\xi\eta}$	$2.13940 \times 10^{-4}$	$5.16837 \times 10^{-8}$	$2.33679 \times 10^{-7}$

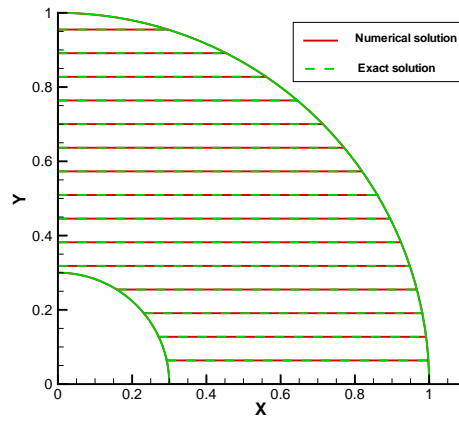
表 4.1: 扇形網格轉換成均勻網格其矩陣張量項在三種不同方法下的 $L_2$  norms比較

	傳統二階中央差分	原始CCD	SCL-CCD
$y_\xi$	$3.92666 \times 10^{-3}$	$1.48534 \times 10^{-5}$	$1.48534 \times 10^{-5}$
$y_{\xi\xi}$	$2.47135 \times 10^{-2}$	$5.22328 \times 10^{-3}$	$5.22329 \times 10^{-3}$
$x_\eta$	$3.92666 \times 10^{-3}$	$1.48534 \times 10^{-5}$	$1.48534 \times 10^{-5}$
$x_{\eta\eta}$	$2.47135 \times 10^{-2}$	$5.22328 \times 10^{-3}$	$5.22329 \times 10^{-3}$
$x_{\xi\eta}$	$2.00435 \times 10^{-13}$	$5.41312 \times 10^{-12}$	$7.00813 \times 10^{-9}$
$y_{\xi\eta}$	$1.94745 \times 10^{-13}$	$4.51983 \times 10^{-12}$	$6.32922 \times 10^{-9}$

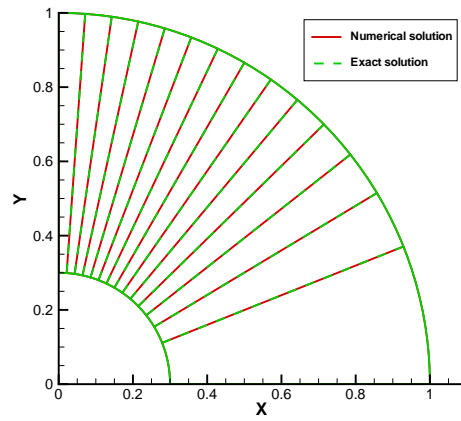
表 4.2: 波浪不規則形網格轉換成均勻網格其矩陣張量項在三種不同方法下的 $L_2$  norms比較



(a)

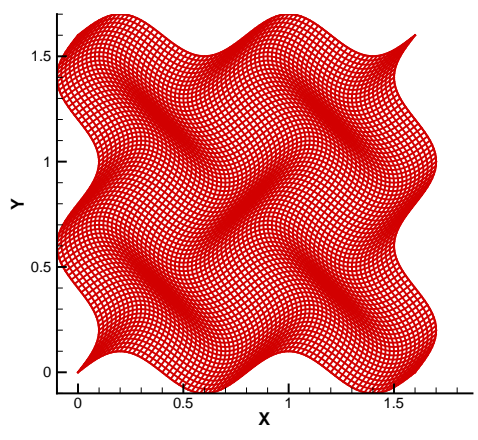


(b)

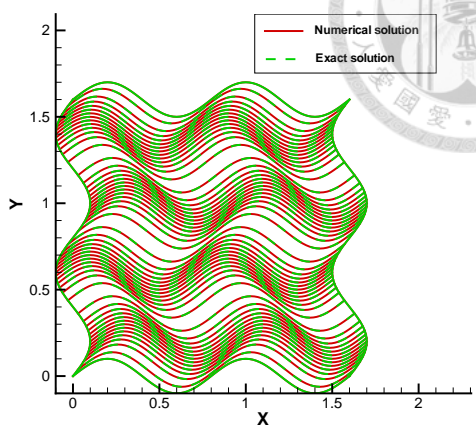


(c)

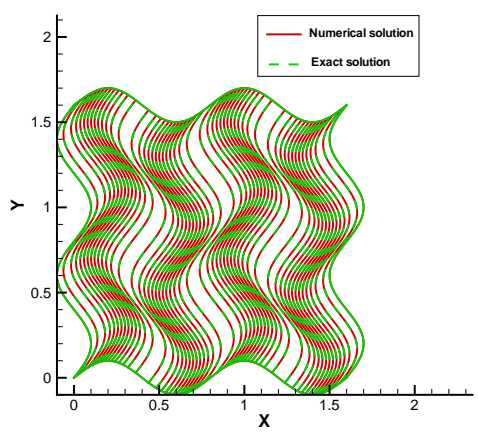
圖 4.1: (a)扇形網格；以及數值解和實解之比較 (b)  $x_\xi$ ; (c)  $x_\eta$



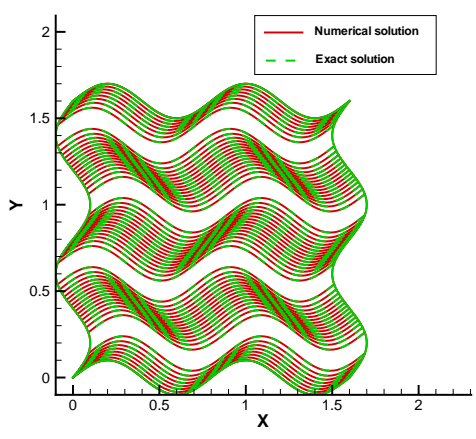
(a)



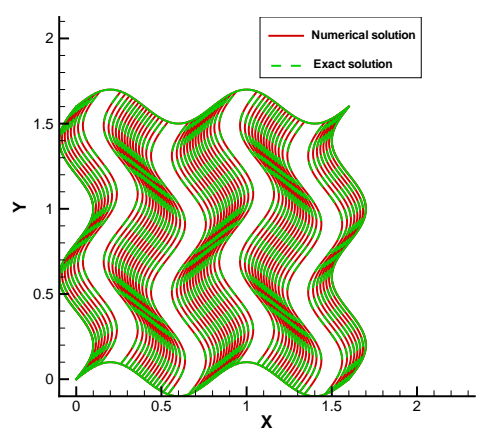
(b)



(c)

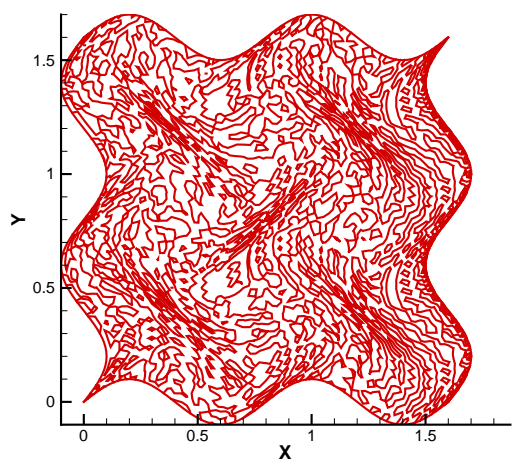


(d)

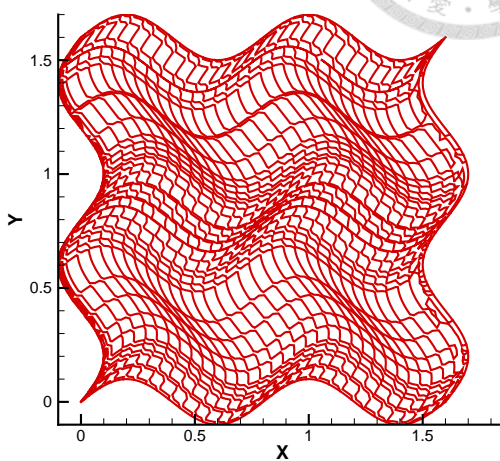


(e)

圖 4.2: (a)波浪不規則形網格；以及數值解和實解之比較 (b)  $x_\eta$  ; (c)  $y_\xi$  ; (d)  $x_{\eta\eta}$  ; (e)  $y_{\xi\xi}$

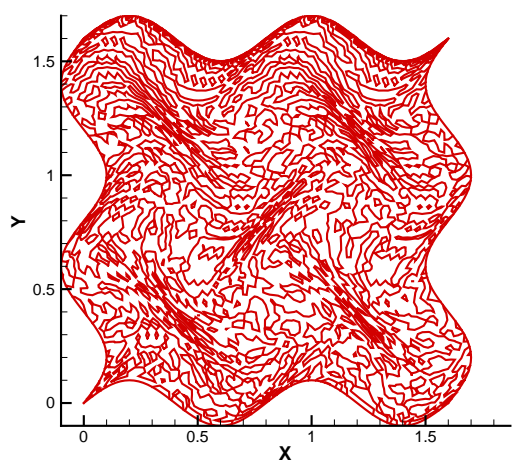


(a)

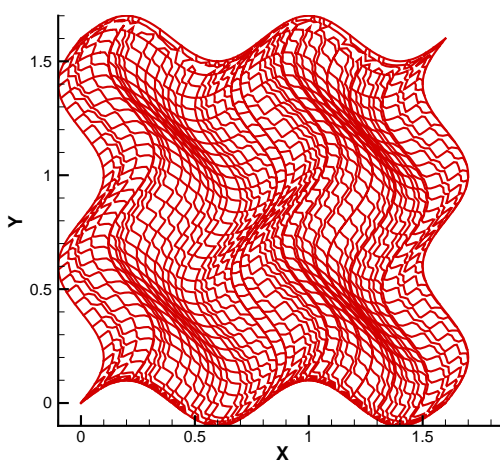


(b)

圖 4.3: 使用兩種不同方法之 $x_{\xi\xi}$ 誤差的分布圖 (a) 原始 CCD ; (b) SCL-CCD

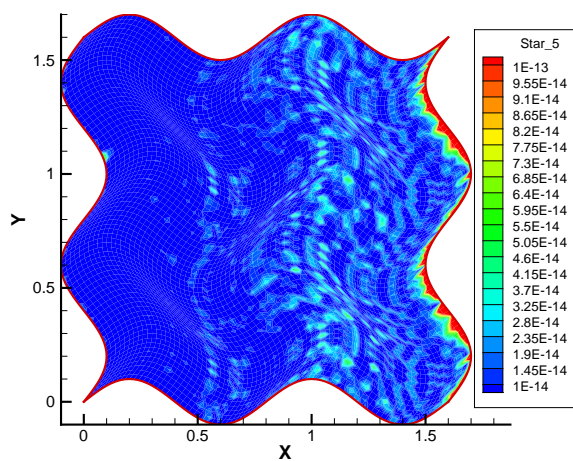


(a)

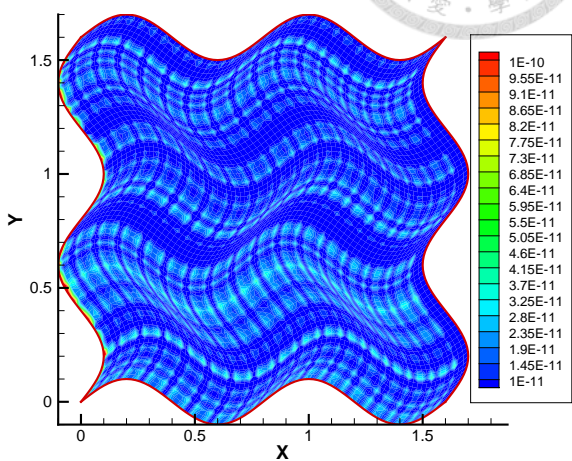


(b)

圖 4.4: 使用兩種不同方法之 $y_{\eta\eta}$ 誤差的分布圖 (a) 原始 CCD ; (b) SCL-CCD

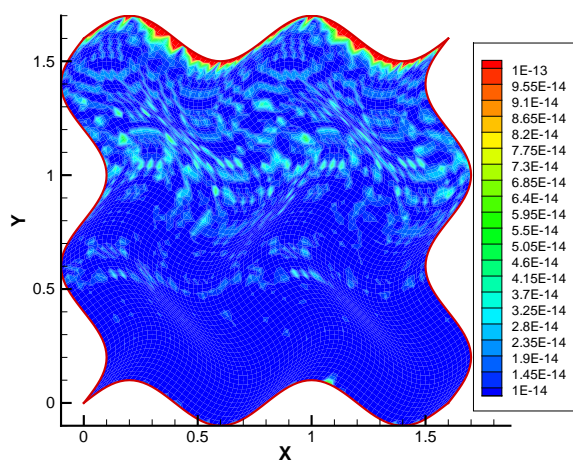


(a)

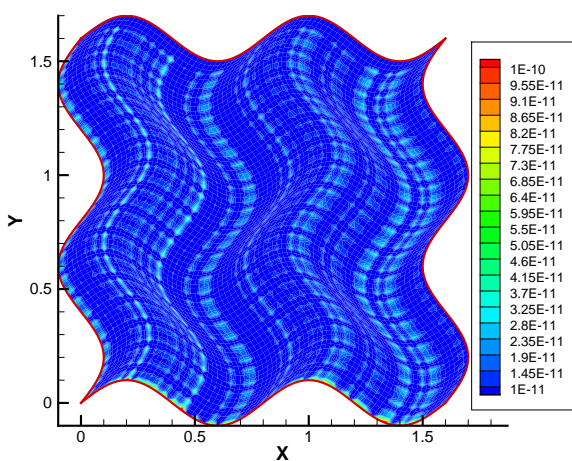


(b)

圖 4.5: 使用兩種不同方法之 $x_\xi$ 誤差的等高圖 (a) 原始 CCD ; (b) SCL-CCD



(a)



(b)

圖 4.6: 使用兩種不同方法之 $y_\eta$ 誤差的等高圖 (a) 原始 CCD ; (b) SCL-CCD



## 第五章

### 數值模型

計算流體力學(Computational Fluid Dynamics)是將所欲模擬的問題，利用數學模型表示之，即所謂的控制方程，並且使用數值方法，配合時間、空間的近似程序，在計算機進行流場的數值模擬。使用數值方法進行分析具下列的幾項優點：

- 一、成本及花費時間較實驗方法為低。
- 二、容易調整參數。
- 三、可以得到在各個計算位置上的詳細物理量。
- 四、理想的條件和狀況較容易設定。

目前，最常被應用於計算流體力學的數值方法有有限元素法(finite element method，簡稱FEM)、有限體積法(finite volume method，簡稱FVM)、有限差分法(finite difference method，簡稱FDM)。本文採用有限差分法來離散方程式。

有限差分法的理論主要是架構在差分理論(difference theory)以及泰勒(Taylor)級數展開，並將描述物理的微分方程轉換成代數型式的方程。首先，給定一計算範圍，將其劃分成有限個網格點以取代連續的求解區域。接著，在滿足微分方程的節點上進行離散，以建立一組對應的代數方程，以取代原本的微分方程。



## 5.1 時間之離散

考慮某一物理量 $\phi$ 對時間 $t$ 的一階偏導數，如下所示：

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = F(\phi, t) \quad (5.1)$$

使用一階準確之前項差分(forward difference)方式，對方程式(5.1)進行離散，可寫成：

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = F(\phi^n, t^n) \quad (5.2)$$

其中， $\phi^{n+1}$ 為下一個時間步的解， $\phi^n$ 為當下時間步已知的解， $F$ 為空間中交互影響反應在當下時間的量，藉由移項即可得到 $\phi^{n+1}$ 的表示式，當 $\phi^{n+1}$ 趨近 $\phi^n$ 時，表示解已經達到穩態。

## 5.2 空間之離散 - Combined Compact difference method

對於傳輸模型方程 $a\frac{\partial \phi}{\partial x} + b\frac{\partial \phi}{\partial y} - k(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}) = f$ 而言，其中 $k$ 為擴散係數， $a$ 和 $b$ 分別是沿著 $x$ 和 $y$ 方向的速度， $f$ 為源項。本文所提出的方法對於對流項可以較好的滿足頻散關係，同時也藉由增加頻散的準確性來提升對流項的穩定性。做法是將一階偏導數及二階偏導數建立在三點緊緻的架構下，並組合成一緊緻的差分格式。接著，透過模型方程分析(modified equation analysis)，再配合傅立葉轉換分析(Fourier transform analysis)，可以推導出近似於原方程波數關係之修正波數關係(modified wavenumber relation)。此一方法相較於其他同樣是建立在三點架構下的差分方法有著更高的精確度，同時可使數值解具有波數關係得以保持的特

性 [21]。令一階偏導數及二階偏導數之三點緊緻差分格式以下式表示之：

$$\begin{aligned} & a_1 \frac{\partial \phi}{\partial x}|_{i-1} + \frac{\partial \phi}{\partial x}|_i \\ &= \frac{1}{h} (c_1 \phi_{i-1} + c_2 \phi_i + c_3 \phi_{i+1}) - h \left( b_1 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}|_{i-1} + b_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}|_i + b_3 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}|_{i+1} \right) \end{aligned} \quad (5.3)$$

$$\begin{aligned} & \bar{b}_1 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}|_{i-1} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}|_i + \bar{b}_3 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}|_{i+1} \\ &= \frac{1}{h^2} (\bar{c}_1 \phi_{i-1} + \bar{c}_2 \phi_i + \bar{c}_3 \phi_{i+1}) - \frac{1}{h} \left( \bar{a}_1 \frac{\partial \phi}{\partial x}|_{i-1} + \bar{a}_2 \frac{\partial \phi}{\partial x}|_i + \bar{a}_3 \frac{\partial \phi}{\partial x}|_{i+1} \right) \end{aligned} \quad (5.4)$$

同理，y方向之一階導數 $\frac{\partial \phi}{\partial y}$ 和二階導數 $\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}$ 也可以同樣的被表示成上述之形式。其中 $\frac{\partial \phi}{\partial x}|_i$ 和 $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}|_i$ 是相依的，並與 $\frac{\partial \phi}{\partial x}|_{i-1}$ ， $\frac{\partial \phi}{\partial x}|_{i+1}$ ， $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}|_{i-1}$ ， $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}|_{i+1}$ ， $\phi_{i-1}$ ， $\phi_i$ ， $\phi_{i+1}$ 這些項是相互耦合的關聯。

### 5.2.1 二階偏導數項之緊緻格式

如果使用一般傳統的中央差分(central difference)來近似二階偏導數項，其離散誤差會有耗散(dissipative)的情形，為此，將藉由模型方程分析(modified equation analysis)來求得(5.4)中的各權重係數，以期得到較高的空間精確度。

首先，利用泰勒展開式(Taylor series expansion)將 $\phi_{i\pm 1}$ ， $\frac{\partial \phi}{\partial x}|_{i\pm 1}$ ， $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}|_{i\pm 1}$ 分別對 $\phi_i$ ， $\frac{\partial \phi}{\partial x}|_i$ ， $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}|_i$ 展開之，藉由消去模型方程(modified equation)中最大的誤差項，如此一來，可以得到如下8條代數方程組：

$$\bar{c}_1 + \bar{c}_2 + \bar{c}_3 = 0 \quad (5.5)$$

$$-\bar{a}_1 - \bar{a}_2 - \bar{a}_3 - \bar{c}_1 + \bar{c}_3 = 0 \quad (5.6)$$

$$\bar{a}_1 - \bar{a}_3 - \bar{b}_1 + \frac{\bar{c}_1}{2} - \bar{b}_3 + \frac{\bar{c}_3}{2} = 1 \quad (5.7)$$

$$-\frac{\bar{a}_1}{2} - \frac{\bar{a}_3}{2} + \bar{b}_1 - \bar{b}_3 - \frac{\bar{c}_1}{6} + \frac{\bar{c}_3}{6} = 0 \quad (5.8)$$

$$\frac{\bar{a}_1}{6} - \frac{\bar{a}_3}{6} - \frac{\bar{b}_1}{2} + \frac{\bar{c}_1}{24} - \frac{\bar{b}_3}{2} + \frac{\bar{c}_3}{24} = 0 \quad (5.9)$$

$$-\frac{\bar{a}_1}{24} - \frac{\bar{a}_3}{24} + \frac{\bar{b}_1}{6} - \frac{\bar{b}_3}{6} - \frac{\bar{c}_1}{120} + \frac{\bar{c}_3}{120} = 0 \quad (5.10)$$

$$\frac{\bar{a}_1}{120} - \frac{\bar{a}_3}{120} - \frac{\bar{b}_1}{24} - \frac{\bar{b}_3}{24} + \frac{\bar{c}_1}{720} + \frac{\bar{c}_2}{720} = 0 \quad (5.11)$$

$$-\frac{\bar{a}_1}{720} - \frac{\bar{a}_3}{720} + \frac{\bar{b}_1}{120} - \frac{\bar{b}_3}{120} - \frac{\bar{c}_1}{5040} + \frac{\bar{c}_3}{5040} = 0 \quad (5.12)$$

藉由求解上述之聯立方程組，可以推導出(5.4)中的未定係數，即  $\bar{a}_1 = -\frac{9}{8}, \bar{a}_2 = 0, \bar{a}_3 = \frac{9}{8}, \bar{b}_1 = -\frac{1}{8}, \bar{b}_3 = -\frac{1}{8}, \bar{c}_1 = 3, \bar{c}_2 = -6, \bar{c}_3 = 3$ 。所得到之二階偏導數近似式如下所示，可達六階準確

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} |_{exact} + \frac{h^6}{20160} \frac{\partial^8 \phi}{\partial x^8} + \frac{h^8}{604800} \frac{\partial^{10} \phi}{\partial x^{10}} + O(h^{12}) + \dots \quad (5.13)$$

## 5.2.2 一階偏導數項頻散保持之緊緻格式

在(5.3)中有  $a_1, b_1, b_2, b_3, c_1, c_2$  和  $c_3$  七個未定係數，同樣是利用泰勒展開式(Taylor series expansion)將  $\phi_{i\pm 1}, \frac{\partial \phi}{\partial x} |_{i-1}, \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} |_{i\pm 1}$  分別對  $\phi_i, \frac{\partial \phi}{\partial x} |_i, \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} |_i$  展開，藉由消去模型方程(modified equation)中較大的誤差項，可以推導出以下之代數方程式：

$$c_1 + c_2 + c_3 = 0 \quad (5.14)$$

$$-a_1 - c_1 + c_3 = 1 \quad (5.15)$$

$$-a_1 + b_1 + b_2 + b_3 - \frac{c_1}{2} - \frac{c_3}{2} = 0 \quad (5.16)$$

$$\frac{a_1}{2} - b_1 + b_3 + \frac{c_1}{6} - \frac{c_3}{6} = 0 \quad (5.17)$$

$$-\frac{a_1}{6} + \frac{b_1}{2} + \frac{b_3}{2} - \frac{c_1}{24} - \frac{c_3}{24} = 0 \quad (5.18)$$

$$\frac{a_1}{24} - \frac{b_1}{6} + \frac{b_3}{6} + \frac{c_1}{120} - \frac{c_3}{120} = 0 \quad (5.19)$$

當對流項遠大於擴散項時，一階偏導數的近似顯得非常重要，從波傳遞的方向來看，如果只消去泰勒展開式中最大的誤差項，並不完全地符合物理，為了從(5.4)中精確的近似一階偏導數項，必須盡可能保持頻散之特性。為了保持頻散關係，吾人將運用  $\phi$  的傅立葉轉換與其逆轉換，即如下所示之式：

$$\tilde{\phi}(\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x) \exp(-i\alpha x) dx, \quad (5.20)$$

$$\phi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(\alpha) \exp(i\alpha x) d\alpha. \quad (5.21)$$

其中  $i$  定義為  $\sqrt{-1}$ 。接著對(5.3)及(5.4)兩式中等號左、右兩邊之各項取傅立葉轉換，可以推導出如下兩條方程之真實波數  $\alpha$  的表示式：

$$\begin{aligned} i\alpha h (a_1 \exp(-i\alpha h) + 1) &\simeq c_1 \exp(-i\alpha h) + c_2 + c_3 \exp(i\alpha h) \\ &\quad - (i\alpha h)^2 (b_1 \exp(-i\alpha h) + b_2 + b_3 \exp(i\alpha h)) \end{aligned} \quad (5.22)$$

$$\begin{aligned}
(\mathbf{i}\alpha h)^2 \left( -\frac{1}{8} \exp(-\mathbf{i}\alpha h) + 1 - \frac{1}{8} \exp(\mathbf{i}\alpha h) \right) &\simeq 3 \exp(-\mathbf{i}\alpha h) - 6 + 3 \exp(\mathbf{i}\alpha h) \\
&\quad - \mathbf{i}\alpha h \left( -\frac{9}{8} \exp(-\mathbf{i}\alpha h) + \frac{9}{8} \exp(\mathbf{i}\alpha h) \right)
\end{aligned} \tag{5.23}$$

由近似的觀點視之，修正波數(modified wavenumber)  $\alpha'$  和  $\alpha''$  可以被推導成與(5.22)和(5.23)中等號右邊相同的表示式，即

$$\begin{aligned}
\mathbf{i}\alpha' h (a_1 \exp(-\mathbf{i}\alpha h) + 1) &= c_1 \exp(-\mathbf{i}\alpha h) + c_2 + c_3 \exp(\mathbf{i}\alpha h) \\
&\quad - (\mathbf{i}\alpha'' h)^2 (b_1 \exp(-\mathbf{i}\alpha h) + b_2 + b_3 \exp(\mathbf{i}\alpha h))
\end{aligned} \tag{5.24}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{i}\alpha' h \left( -\frac{9}{8} \exp(-\mathbf{i}\alpha h) + \frac{9}{8} \exp(\mathbf{i}\alpha h) \right) &= 3 \exp(-\mathbf{i}\alpha h) - 6 + 3 \exp(\mathbf{i}\alpha h) \\
&\quad - (\mathbf{i}\alpha'' h)^2 \left( -\frac{1}{8} \exp(-\mathbf{i}\alpha h) + 1 - \frac{1}{8} \exp(\mathbf{i}\alpha h) \right)
\end{aligned} \tag{5.25}$$

藉由求解(5.24)和(5.25)，可推得 $\alpha'$ 和 $\alpha''$ 之表示式如下：

$$\begin{aligned}
\alpha' h &= -\mathbf{i}(24b_1 \exp(-2\mathbf{i}\alpha h) + c_1 \exp(-2\mathbf{i}\alpha h) + c_3 + c_1 + 24b_1 + c_2 \exp(-\mathbf{i}\alpha h) \\
&\quad + 24b_2 \exp(-\mathbf{i}\alpha h) + 24b_3 - 48b_1 \exp(-\mathbf{i}\alpha h) - 8c_1 \exp(-\mathbf{i}\alpha h) \\
&\quad - 48b_3 \exp(\mathbf{i}\alpha h) + 24b_2 \exp(\mathbf{i}\alpha h) + 24b_3 \exp(2\mathbf{i}\alpha h) - 48b_2 \\
&\quad + c_2 \exp(\mathbf{i}\alpha h) + c_3 \exp(2\mathbf{i}\alpha h) - 8c_3 \exp(\mathbf{i}\alpha h) - 8c_2) \\
&\quad / (-8 + \exp(\mathbf{i}\alpha h) - 8a_1 \exp(-\mathbf{i}\alpha h) + a_1 \exp(-2\mathbf{i}\alpha h) - 9b_1 \exp(-2\mathbf{i}\alpha h) \\
&\quad - 9b_2 \exp(-\mathbf{i}\alpha h) + 9b_2 \exp(\mathbf{i}\alpha h) + 9b_3 \exp(2\mathbf{i}\alpha h) + a_1 + 9b_1 - 9b_3 + \exp(\mathbf{i}\alpha h))
\end{aligned} \tag{5.26}$$

$$\alpha'' h = \sqrt{-\frac{3 \exp(-\mathbf{i}\alpha h) - 6 + 3 \exp(\mathbf{i}\alpha h) - \mathbf{i}\alpha' h \left( -\frac{9}{8} \exp(-\mathbf{i}\alpha h) + \frac{9}{8} \exp(\mathbf{i}\alpha h) \right)}{-\frac{1}{8} \exp(-\mathbf{i}\alpha h) + 1 - \frac{1}{8} \exp(\mathbf{i}\alpha h)}} \tag{5.27}$$

爲了使 $\alpha'$ 得到更佳的頻散準確性，我們要求 $\alpha h \approx \Re[\alpha' h]$ ，其中 $\Re[\alpha' h]$ 爲 $\alpha' h$ 的實部。

爲了極小化修正波數與真實波數之間的誤差量，吾人定義如下的誤差函數 $E$ ：

$$E(\alpha) = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} [W(\alpha h - \Re[\alpha' h])]^2 d(\alpha h) = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} [W(\gamma - \Re[\gamma])]^2 d\gamma \tag{5.28}$$



其中 $\gamma = \alpha h$ 和 $\gamma' = \alpha' h$ 。 權重函數 (weighting function)  $W$ 之定義如下：

$$\begin{aligned}
W = & -16 + 72b_3 + 72b_1 - 81b_1^2 - 81b_3^2 - 81b_2^2 \\
& - 162b_2b_3\cos(\gamma) - 144a_1b_3\cos(\gamma) - 162b_1b_2\cos(\gamma) \\
& - a_1^2\cos(\gamma)^2 + 8a_1^2\cos(\gamma) - 18b_3\cos(\gamma)^3 + 18b_1\cos(\gamma)^3 \\
& + 81b_2^2\cos(\gamma)^2 + 162b_1b_3 - 72b_1\cos(\gamma)^2 \\
& + 81b_3^2\cos(\gamma)^2 + 81b_1^2\cos(\gamma)^2 - 72a_1b_2 - 18b_1\cos(\gamma) \quad (5.29) \\
& + 16a_1\cos(\gamma)^2 - 2a_1\cos(\gamma)^3 + 72b_3\cos(\gamma)^2 \\
& + 18b_3\cos(\gamma) - 32a_1\cos(\gamma) - 36a_1b_3\cos(\gamma)^4 - 18a_1b_2\cos(\gamma)^3 + 162b_2b_3\cos(\gamma)^3 \\
& + 162b_1b_2\cos(\gamma)^3 + 324b_1b_3\cos(\gamma)^4 + 72a_1b_2\cos(\gamma)^2 + 144a_1b_3\cos(\gamma)^3 \\
& - 486b_1b_3\cos(\gamma)^2 + 36a_1b_3\cos(\gamma)^2 + 18a_1b_2\cos(\gamma) + 8\cos(\gamma) - 16a_1^2 - \cos(\gamma)^2
\end{aligned}$$

爲了讓 $E$ 爲一正值並使該正值爲最小，強迫採用一次微分式等於零的觀念，可得下式

$$\frac{\partial E}{\partial c_3} = 0 \quad (5.30)$$

上式即爲頻散關係保持的條件。利用(5.30)，再配合先前由模型方程所推導出的六條代數方程，吾人即可聯立求解出七個未定係數  $a_1 = 0.875$ ,  $b_1 = 0.12512823415990895606$ ,  $b_2 = -0.24871765840091043936$ ,  $b_3 = 0.0001282341599089560636$ ,  $c_1 = -1.9359611900810925272$ ,  $c_2 = 1.9969223801621850545$ ,  $c_3 = -0.060961190081092527237$ . 將這一組係數代回模型方程中，可知所求的之一階偏導數具有五階的準確性。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \phi}{\partial x} = & \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{exact} - 0.0007008561524398922475 h^5 \frac{\partial^6 \phi}{\partial x^6} + 0.0001984126984126984127 h^6 \frac{\partial^7 \phi}{\partial x^7} \\
& - 0.0000498830507458330390 h^7 \frac{\partial^8 \phi}{\partial x^8} + O(h^8) + \dots \quad (5.31)
\end{aligned}$$

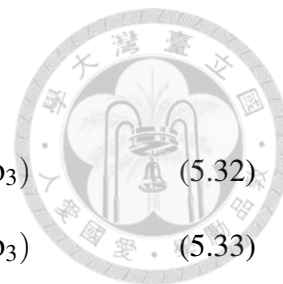
對於邊界點, 我們使用以下具四階精確度之合併緊緻格式:

$$\phi_1' + 2\phi_2' - h\phi_2'' = \frac{1}{h}(-3.5\phi_1 + 4\phi_2 - 0.5\phi_3) \quad (5.32)$$

$$h\phi_1'' + 5h\phi_2'' - 6\phi_2' = \frac{1}{h}(9\phi_1 - 12\phi_2 + 3\phi_3) \quad (5.33)$$

$$\phi_N' + 2\phi_{N-1}' + h\phi_{N-1}'' = \frac{1}{h}(3.5\phi_N - 4\phi_{N-1} + 0.5\phi_{N-2}) \quad (5.34)$$

$$h\phi_N'' + 5h\phi_{N-1}'' + 6\phi_{N-1}' = \frac{1}{h}(9\phi_N - 12\phi_{N-1} + 3\phi_{N-2}) \quad (5.35)$$





## 第六章

### 壓力控制方程之推導

在求解不可壓縮Navier-Stokes方程時，主要的難題為當雷諾數( $Re$ )很高時，在動量方程式中對流項的影響會非常地顯著，以及不可壓縮的限制條件，也就是所謂的連續方程( $\nabla \cdot u = 0$ )。由動量方程式來看，壓力和速度是互相耦合的，但在求解過程中，因壓力會增加求解Navier-Stokes方程的困難度，如果兩者無法耦合，會造成壓力計算上的麻煩，其他像是保證連續方程( $u_x + v_y \equiv 0$ )、正確壓力邊界條件的數值處理，都不是輕易得以解決的，因此在求解Navier-Stokes方程組時，如何求解壓力仍有相當的難度。在本節中我們將測試不同壓力的邊界條件，以及推導在卡式與曲線座標下高階壓力方程之離散。

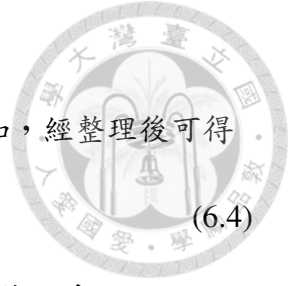
#### 6.1 傳統壓力控制方程式

考慮以下二維不可壓縮之Navier-Stokes方程:

$$D = u_x + v_y = 0 \quad (6.1)$$

$$u_t + uu_x + vv_y = -p_x + \frac{1}{Re}(u_{xx} + u_{yy}) \quad (6.2)$$

$$v_t + uv_x + vv_y = -p_y + \frac{1}{Re}(v_{xx} + v_{yy}) \quad (6.3)$$



將方程(6.2)和方程(6.3)分別對 $x$ 及 $y$ 做偏微的動作，並將兩式相加，經整理後可得

$$\nabla^2 p = -D_t - [(u_x)^2 + (v_y)^2 + 2u_y v_x] \quad (6.4)$$

接著，再引入方程(6.1)，即Divergence-free之條件，方程(6.4)可簡化為

$$\nabla^2 p = -[(u_x)^2 + (v_y)^2 + 2u_y v_x] \quad (6.5)$$

上式即為藉由動量方程加上引入連續方程所推出之傳統壓力控制方程式。

## 6.2 加速壓力收斂之壓力控制方程式

由前述之方程組可以看出，壓力Poisson方程(6.4)中並沒有用到 $D \equiv 0$ 的約束條件，所以所求出之數值解，並不一定保證連續方程 $D \equiv 0$ ；而壓力Poisson方程(6.5)是滿足(6.1)此一約束條件，如果從數值分析的角度來看，似乎採用方程(6.5)形式要比方程(6.4)來的簡單些，而且由於方程(6.5)已經滿足 $D \equiv 0$ 的約束條件，故採用方程(6.5)求解壓力應該比採用方程(6.4)更有效。

在數值求解N-S方程組時，(6.1)只是做為計算結果檢驗和保證計算穩定的約束條件。但是，計算誤差會使連續方程式 $u_x + v_y \neq 0$ ，這會引起計算的不穩定性。但是，實際計算經驗指出，在讓 $D_t = 0$ 計算壓力的過程中，每步計算 $D \equiv 0$ 時，總會帶來一定誤差，這個誤差剛開始可能很小，但隨著時間推進，它會逐步累積和擴大，最後會使 $D \equiv 0$ 完全失效，並造成無法收斂的結果；然而採用(6.4)計算時，透過此一修正，可以使每一步計算 $D \equiv 0$ 得到滿足，因此，在實際計算壓力時是採用方程(6.4)，即有保留 $D_t$ 這一項之方程。

## 6.3 壓力方程之邊界條件及其評估

當給定不可壓縮流體方程組適當的初始與邊界條件後，雖然可以藉由聯立求解動量方程與壓力Poisson方程來求得速度場和壓力場，但由於在邊界上未提及壓力的邊界條件，如果對所解出的壓力任意加、減一常數也都是方程的解，即壓



力場的解並不是唯一的。以下將採用方程(6.4)來求解壓力，透過測試不同壓力的邊界條件，來計算方腔拉穴流在雷諾數為1000時的情形，並比較由不同壓力邊界條件所算出之壓力其中心線的剖面圖。

二維不可壓縮之Navier-Stokes方程在 $x$ 與 $y$ 方向分別為:

$$u_t + uu_x + vv_y = -p_x + \frac{1}{Re}(u_{xx} + u_{yy}) \quad (6.6)$$

$$v_t + uv_x + vv_y = -p_y + \frac{1}{Re}(v_{xx} + v_{yy}) \quad (6.7)$$

如果對方程式(6.6)及(6.7)做移項的動作，可以得到壓力Neumann的邊界條件為

BC-1:

$$p_x = -u_t - (uu_x + vv_y) + \frac{1}{Re}(u_{xx} + u_{yy}) \quad (6.8)$$

$$p_y = -v_t - (uv_x + vv_y) + \frac{1}{Re}(v_{xx} + v_{yy}) \quad (6.9)$$

(6.8)及(6.9)為直接由動量方程式移項得到，從數學的角度來看，它是符合原方程式的，故將此一邊界條件當成基準，並與BC-2 以及文獻 [24]中所推導兩組壓力之邊界條件BC-3及BC-4做一比較。

BC-2:

$$p_x = 0 \quad (6.10)$$

$$p_y = 0 \quad (6.11)$$

BC-3:

$$p_x = \frac{1}{Re}(u_{xx} + u_{yy}) \quad (6.12)$$

$$p_y = \frac{1}{Re}(v_{xx} + v_{yy}) \quad (6.13)$$

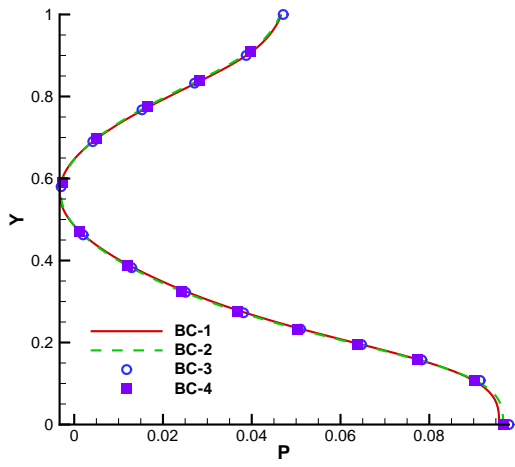
BC-4:

$$p_x = \frac{1}{Re}(u_{xx} + u_{yy}) - \frac{1}{Re}(u_{xx} + v_{yx}) \quad (6.14)$$

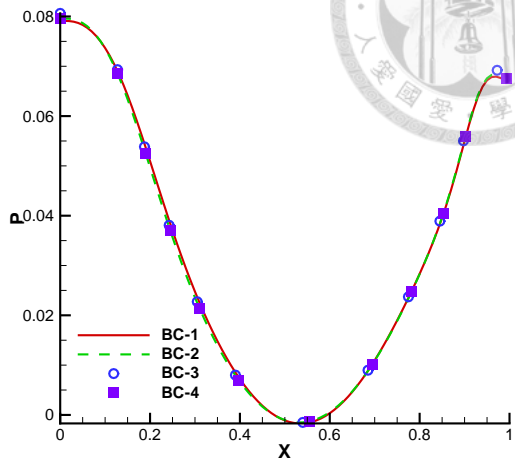
$$p_y = \frac{1}{Re}(v_{xx} + v_{yy}) - \frac{1}{Re}(u_{xy} + v_{yy}) \quad (6.15)$$



由中心線的壓力剖面圖(6.1)來看，發現四種壓力邊界條件所計算出來的結果是差不多的，比較明顯不一樣的地方為在靠近壁面處，因此將靠近壁面的結果放大如圖6.2所示，在 $x = 0.5$ 時所取靠近壁面為 $y = 0.99 \sim 1$ 以及 $y = 0 \sim 0.01$ 如圖6.3所示；在 $y = 0.5$ 時所取靠近壁面為 $x = 0 \sim 0.01$ 以及 $x = 0.99 \sim 1$ 如圖6.4所示，觀察到四種邊界條件所算出來的壓力在靠近壁面處，其值的大小都蠻接近，沿著 $x$ 和 $y$ 方向壓力並沒有什麼變化，代表靠近邊界的壓力梯度幾乎為零。由所測試出來的結果可以知道，四種壓力之邊界條件都能算出不錯的結果。在本文中，吾人所選用之壓力邊界條件為BC-1。

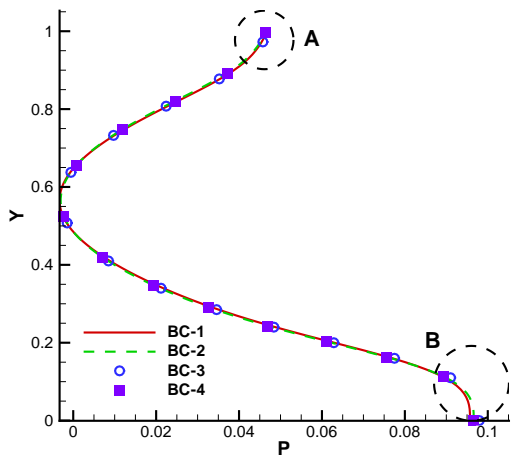


(a)

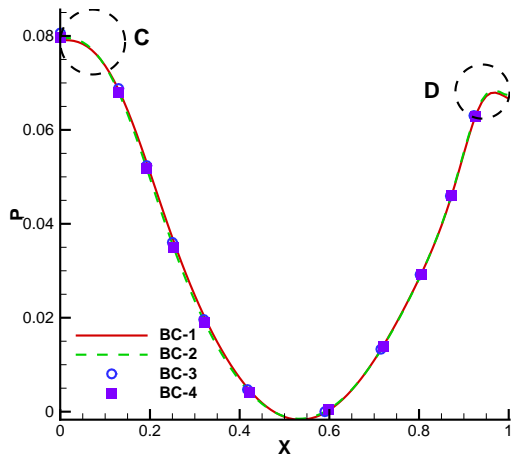


(b)

圖 6.1: 使用四種不同壓力邊界條件所算出之壓力在中心線的剖面圖 (a)  $x = 0.5$ ; (b)  $y = 0.5$

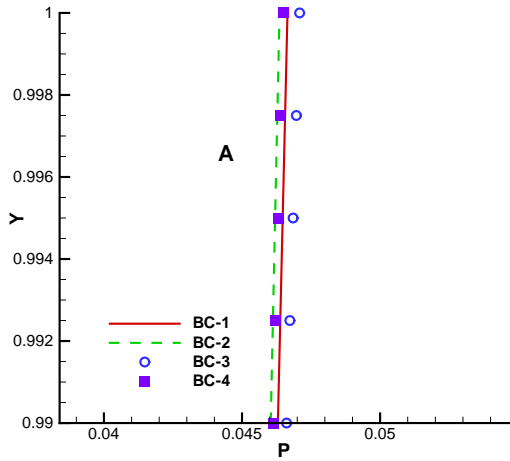
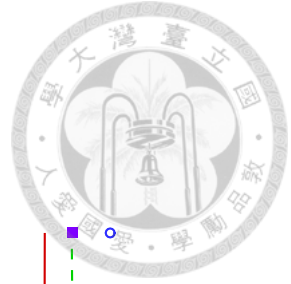


(a)

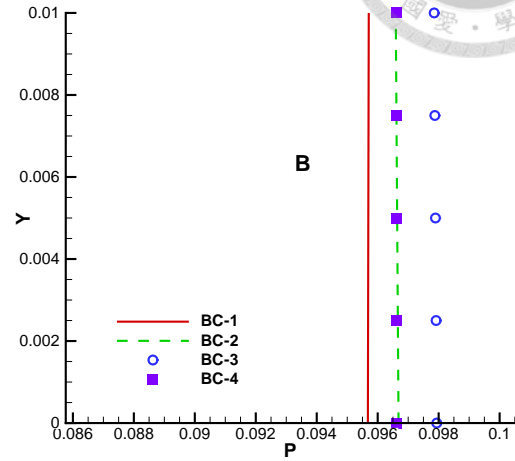


(b)

圖 6.2: 使用四種不同壓力邊界條件所算出之壓力在中心線的剖面圖在靠近壁面所放大的區域 (a)  $x = 0.5$ : A, B; (b)  $y = 0.5$ : C, D

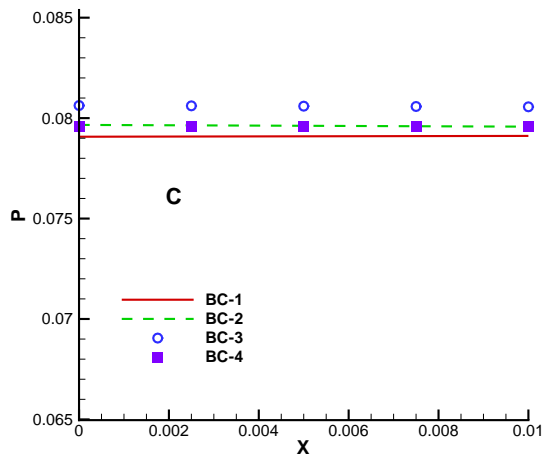


(a)

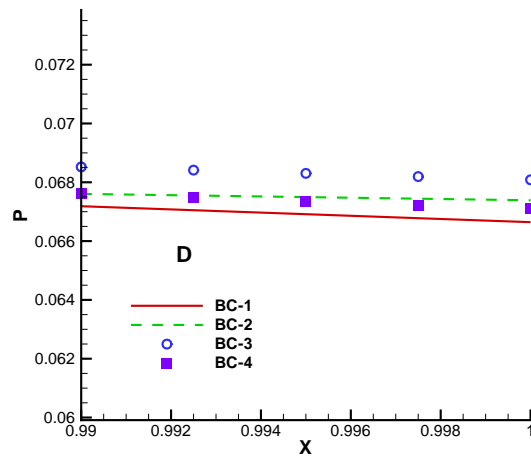


(b)

圖 6.3: 使用四種不同壓力邊界條件所算出之壓力在中心線  $x = 0.5$  的剖面圖在靠近壁面所放大的區域 (a)  $y = 0.99 \sim 1$ ; (b)  $y = 0 \sim 0.01$



(a)



(b)

圖 6.4: 使用四種不同壓力邊界條件所算出之壓力在中心線  $y = 0.5$  的剖面圖在靠近壁面所放大的區域 (a)  $x = 0 \sim 0.01$ ; (b)  $x = 0.99 \sim x = 1$



## 6.4 卡式座標下高階壓力方程之離散

爲了得到更高的精確度與正確性，考慮壓力之Poisson方程如下：

$$\nabla^2 p = f \quad (6.16)$$

利用二階準確之中央差分格式對(6.16)做離散，可得

$$\delta_x^2 p_{ij} + \delta_y^2 p_{ij} - \tau_{ij} = f_{ij} \quad (6.17)$$

其中截斷誤差 $\tau_{ij}$ 爲

$$\tau_{ij} = \left[ \frac{\partial^4 p}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 p}{\partial y^4} \right]_{ij} \frac{h^2}{12} + \left[ \frac{\partial^6 p}{\partial x^6} + \frac{\partial^6 p}{\partial y^6} \right]_{ij} \frac{h^4}{360} + O(h^6) \quad (6.18)$$

考慮 $\tau_{ij}$ 之低階誤差項 $O(h^2)$ 及 $O(h^4)$ ，其離散方程(6.17)之精確度提高爲 $O(h^6)$ 。對於 $O(h^2)$ 項的四階導數項次，吾人利用原壓力之Poisson方程變換，可得

$$\frac{\partial^4 p}{\partial x^4} = -\frac{\partial^4 p}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (6.19)$$

$$\frac{\partial^4 p}{\partial y^4} = -\frac{\partial^4 p}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \quad (6.20)$$

將(6.19)及(6.20)代回截斷誤差(6.18)中，可得

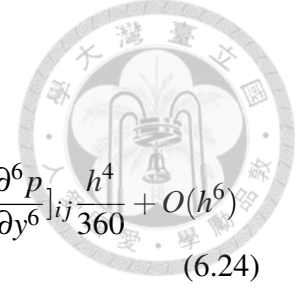
$$\tau_{ij} = \left[ \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2\frac{\partial^4 p}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right]_{ij} \frac{h^2}{12} + \left[ \frac{\partial^6 p}{\partial x^6} + \frac{\partial^6 p}{\partial y^6} \right]_{ij} \frac{h^4}{360} + O(h^6) \quad (6.21)$$

其中 $\frac{\partial^4 p}{\partial x^2 \partial y^2} |_{ij}$ 的近似爲以下之形式

$$\frac{\partial^4 p}{\partial x^2 \partial y^2} |_{ij} = \delta_x^2 \delta_y^2 p_{ij} - \left[ \left( \frac{\partial^6 p}{\partial x^4 \partial y^2} + \frac{\partial^6 p}{\partial x^2 \partial y^4} \right) \right]_{ij} \frac{h^2}{12} + O(h^4) \quad (6.22)$$

將式(6.21)代回離散方程式(6.17)中，經整理後可得具四階準確之壓力Poisson方程，其緊緻格式如 [23] 所示

$$\delta_x^2 p_{ij} + \delta_y^2 p_{ij} + \frac{h^2}{6} \delta_x^2 \delta_y^2 p_{ij} - \tau_{ij} = f_{ij} + \frac{h^2}{12} (\delta_x^2 f_{ij} + \delta_y^2 f_{ij}) \quad (6.23)$$



接著，利用有限差分展開截斷誤差項並代回(6.21)，可得

$$\tau_{ij} = \left[ \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial^4 p}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right]_{ij} \frac{h^2}{12} + \left[ \frac{\partial^6 p}{\partial x^6} + 5 \frac{\partial^6 p}{\partial x^4 \partial y^2} + 5 \frac{\partial^6 p}{\partial x^2 \partial y^4} + \frac{\partial^6 p}{\partial y^6} \right]_{ij} \frac{h^4}{360} + O(h^6) \quad (6.24)$$

由方程(6.24)可知，若同時將截斷誤差中 $O(h^4)$ 的項次一併考慮，可以推得具有六階準確之緊緻差分格式，同理，六階導數項之離散分別為

$$\frac{\partial^6 p}{\partial x^6} = -\frac{\partial^6 p}{\partial x^4 \partial y^2} + \frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \quad (6.25)$$

$$\frac{\partial^6 p}{\partial x^6} = -\frac{\partial^6 p}{\partial x^2 \partial y^4} + \frac{\partial^4 f}{\partial y^4} \quad (6.26)$$

以及

$$\frac{\partial^6 p}{\partial x^4 \partial y^2} + \frac{\partial^6 p}{\partial x^2 \partial y^4} = -\frac{\partial^4 f}{\partial x^2 \partial y^2} \quad (6.27)$$

最後，將方程(6.25)、(6.26)、(6.27)與方程(6.24)式代回離散方程(6.17)式，經整理後可得具六階準確之壓力Poisson方程緊緻格式，如 [23]所示

$$\delta_x^2 p_{ij} + \delta_y^2 p_{ij} + \frac{h^2}{6} \delta_x^2 \delta_y^2 p_{ij} - \tau_{ij} = f_{ij} + \frac{h^2}{12} (\delta_x^2 f_{ij} + \delta_y^2 f_{ij}) + \frac{h^4}{360} (\delta_x^4 f_{ij} + \delta_y^4 f_{ij}) + \frac{h^4}{90} \delta_x^2 \delta_y^2 f_{ij} \quad (6.28)$$

在本文中，吾人選用四階準確的緊緻格式來求解壓力Poisson方程。

## 6.5 曲線座標下高階壓力方程之離散

在此，吾人將推導在曲線座標下具四階準確之壓力Poisson方程之緊緻格式。方程(6.16)在曲線座標之形式如下

$$\begin{aligned} & (\alpha p_{\xi\xi} - 2\beta p_{\xi\eta} + \gamma p_{\eta\eta})/J^2 \\ & + [(\alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta})(y_\xi p_\eta - y_\eta p_\xi) \\ & + (\alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta})(x_\eta p_\xi - x_\xi p_\eta)]/J^3 = f \end{aligned} \quad (6.29)$$



經整理後，可得

$$\begin{aligned}
& [J\alpha]p_{\xi\xi} - [2J\beta]p_{\xi\eta} + [J\gamma]p_{\eta\eta} \\
& + [x_{\eta}(\alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta}) - y_{\eta}(\alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta})]p_{\xi} \\
& + [y_{\xi}(\alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta}) - x_{\xi}(\alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta})]p_{\eta} = fJ^3 \quad (6.30)
\end{aligned}$$

(6.30)式又可整理成

$$Ap_{\xi\xi} - Bp_{\xi\eta} + Cp_{\eta\eta} + Dp_{\xi} + Ep_{\eta} = fJ^3 \quad (6.31)$$

其中  $A = J\alpha$ ,  $B = 2J\beta$ ,  $C = J\gamma$ ,  $D = x_{\eta}(\alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta}) - y_{\eta}(\alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta})$ ,  $E = y_{\eta}(\alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta}) - x_{\eta}(\alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta})$ . 利用二階準確之中央差分對(6.31)做離散，可得

$$A\delta_{\xi}^2 p_{ij} - B\delta_{\xi}\delta_{\eta} p_{ij} + C\delta_{\eta}^2 p_{ij} + D\delta_{\xi} p_{ij} + E\delta_{\eta} p_{ij} - \tau_{ij} = f_{ij}J^3 \quad (6.32)$$

其中截斷誤差 $\tau_{ij}$ 為

$$\begin{aligned}
\tau_{ij} = & \left[ \frac{\partial^4 p}{\partial \xi^4} \frac{A}{12} (\Delta \xi)^2 + \frac{\partial^4 p}{\partial \eta^4} \frac{C}{12} (\Delta \eta)^2 \right] + \left[ \frac{\partial^6 p}{\partial \xi^6} \frac{A}{360} (\Delta \xi)^4 + \frac{\partial^6 p}{\partial \eta^6} \frac{C}{360} (\Delta \eta)^4 \right] + O(h^6) \\
& - \left[ \frac{\partial^4 p}{\partial \xi^3 \partial \eta} \frac{C}{6} (\Delta \xi)^2 - \frac{\partial^4 p}{\partial \xi \partial \eta^3} \frac{C}{6} (\Delta \eta)^2 \right] + O(h^4) \\
& - \left[ \frac{\partial^3 p}{\partial \xi^3} \frac{D}{6} (\Delta \xi)^2 + \frac{\partial^3 p}{\partial \eta^3} \frac{E}{6} (\Delta \eta)^2 \right] + \left[ \frac{\partial^5 p}{\partial \xi^5} \frac{D}{120} (\Delta \xi)^4 + \frac{\partial^5 p}{\partial \eta^5} \frac{E}{120} (\Delta \eta)^4 \right] + O(h^6) \quad (6.33)
\end{aligned}$$

將式(6.33)代回式(6.32)中，可得在曲線座標下具四階準確之壓力Poisson方程，其緊緻格式如下

$$\begin{aligned}
A\delta_{\xi}^2 p_{ij} - B\delta_{\xi}\delta_{\eta} p_{ij} + C\delta_{\eta}^2 p_{ij} + D\delta_{\xi} p_{ij} + E\delta_{\eta} p_{ij} - \tau_{ij} = & f_{ij}J^3 + p_{\xi\xi\xi\xi} \frac{A}{12} (\Delta \xi)^2 + p_{\eta\eta\eta\eta} \frac{C}{12} (\Delta \eta)^2 \\
- p_{\xi\xi\xi\eta} \frac{B}{6} (\Delta \xi)^2 - p_{\xi\eta\eta\eta} \frac{B}{6} (\Delta \eta)^2 + p_{\xi\xi\xi\xi} \frac{D}{6} (\Delta \xi)^2 + p_{\eta\eta\eta\eta} \frac{E}{6} (\Delta \eta)^2 \quad (6.34)
\end{aligned}$$



## 6.6 計算程序

本文將利用上述不同的離散方法來求解電滲流方程組，在計算上述方程時採用隱式(Implicit)的型態來近似所待求的物理量，在求解求解矩陣時是利用迭代法(逐次有序的來修改初始猜值)來進行矩陣之求解，使用的迭代方法為SOR (Successive over relaxation)；判定收斂的條件為 $L^2$  error norms之大小，其定義為：

$$L^2 \text{ error norm} = \sqrt{\frac{1}{N_x \cdot N_y} [(A_{1,1}^{n+1} - A_{1,1}^n)^2 + \dots + (A_{i,j}^{n+1} - A_{i,j}^n)^2 + \dots + (A_{N_x, N_y}^{n+1} - A_{N_x, N_y}^n)^2]}$$

其中， $N_x$ 代表x方向的網格點數、 $N_y$ 代表y方向的網格點數、 $A^{n+1}$ 和 $A^n$ 分別代表最新值以及前一次的舊值，當所有變數的 $L_2$  error norm皆小於 $10^{-8}$ 時，求解即已達收斂(Convergence)，並完成一次時間步階(time step)的計算；又 $A^{n+1}$ 可視為最新的時間點， $A^n$ 則為上個時間點，若是前後兩個時間點之間的 $L_2$  error norm小於 $10^{-9}$ ，此一物理系統可視為已趨近於穩態(steady state)，其計算的流程如圖(6.5)所示。

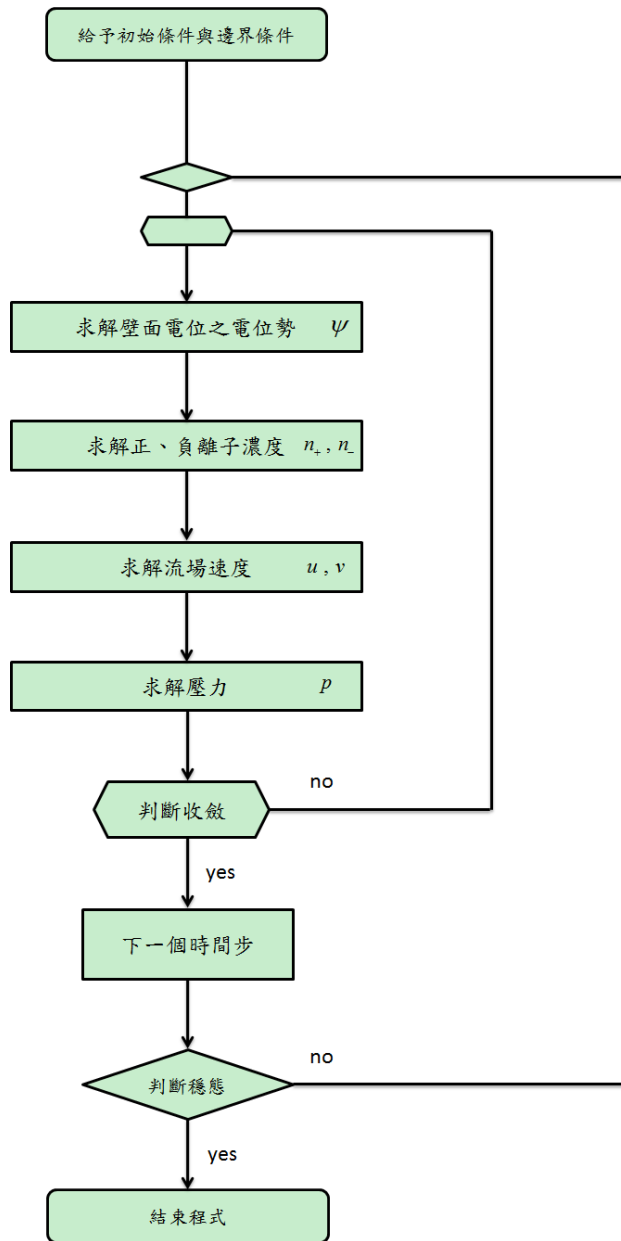


圖 6.5: 計算之流程圖。



## 第七章

### 程式驗證

爲了確保程式的正確性，首先針對Navier-Stokes 方程式進行具實解問題的驗證，並模擬方腔拉穴流的問題，接著對PNP方程以及PNP-NS方程進行實解之驗證，透過這些問題的計算，以確保本文所提出的方法與程式撰寫的正確性。

#### 7.1 流體、電方程組之驗證

##### 7.1.1 Navier-Stokes 方程之實解驗證

滿足二維Navier-Stokes方程組的解析解 $(u, v, p)$ ，並同時滿足散度爲零(divergence free)的實解爲

$$u = \frac{-2(1+y)}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.1)$$

$$v = \frac{2(1+x)}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.2)$$

$$p = \frac{-2}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.3)$$



速度 $u$ 、 $v$ 的邊界條件採用Dirichlet type邊界條件。壓力 $p$ 之求解則是求解PPE方程，其邊界條件是給動量方程(Neumann type)。

#### 7.1.1.1 均勻網格轉換到均勻網格下之實解驗證

爲了驗證程式的正確性以及測試空間上的收斂斜率，因此網格是使用均勻網格轉至均勻網格的方式，並在不同網格數下進行計算；物理域和計算域爲 $(0 \leq x, y \leq 1)$ ,  $(0 \leq \xi, \eta \leq 1)$ ；經過計算後的結果與實解比較所得之誤差( $L_2$  norm error)，如表7.1所示，空間上的收斂斜率 $u$ 、 $v$ 與 $p$ 均可以達到近理論四階之準確性。

#### 7.1.1.2 非均勻網格轉換到均勻網格之實解驗證

爲了驗證將非均勻網格轉換到均勻網格下求解Navier-Stokes方程式的正確性，將曲線外型網格轉換到所對應的正交網格下以進行計算，其中均勻網格的範圍爲 $0 \leq \xi, \eta \leq 1$ ，並分別測試了邊界爲波浪形狀的網格和扇形，計算之結果和實解之比較如圖7.4、7.5所示，可知皆相當的接近實解。

### 7.1.2 方腔拉穴流問題之測試

方腔拉穴流問題爲一典型的流場測試問題，此問題假設在二維的矩形水槽的頂部上方施以一水平驅動力，此力將驅動流場的形成，並在內部產生渦流；尤其在高雷諾數(Reynolds number)時，非線性現象極爲顯著，爲了求解此一不可壓縮粘性流的典型測試問題；如圖7.1所示，其邊界條件爲：

▷ 上邊界:

$$u = 1 \quad , \quad v = 0$$



▷ 其它边界:

$$u = 0, \quad v = 0$$

在此一拉穴流的測試問題中，分別測試了雷諾數等於100、400、1000、5000及7500的情形；當雷諾數增大時，流場內的非線性效應更為明顯，其數值解與Ghia [11]所得在中心線的速度剖面做一比較，結果十分的相近，因此藉由方腔拉穴流問題，可達成程式驗證之目的。

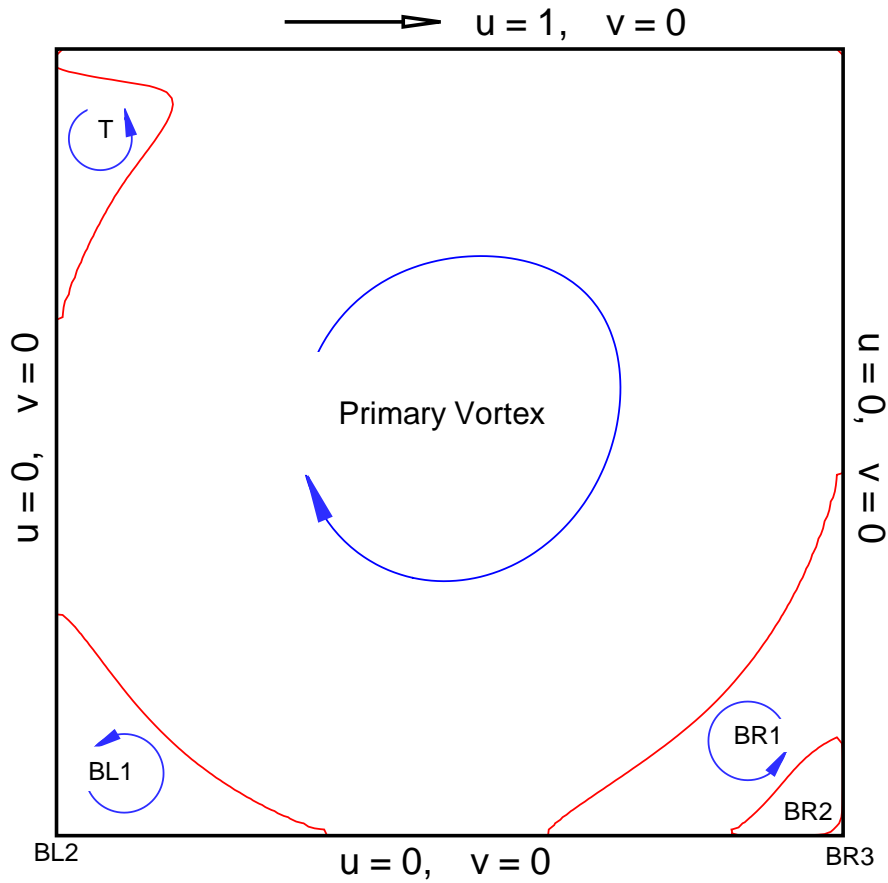


圖 7.1: 二維方腔拉穴流問題之示意圖



### 7.1.3 後向階梯流問題之測試

後向階梯流問題(Backward-facing step)之示意圖如下所示

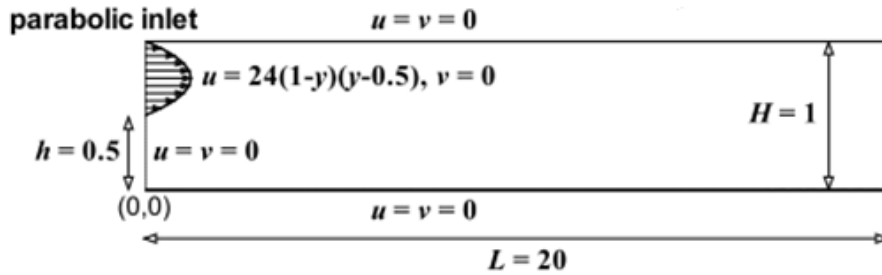


圖 7.2: 後向階梯流問題之示意圖

此問題之物理域為  $L = 20$ ， $H = 1$ ，所計算的雷諾數為 800，其邊界條件為：

▷ 入口邊界:

$$u = 24(1 - y)(y - 0.5) \quad , \quad v = 0$$

▷ 出口邊界:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad , \quad \frac{\partial v}{\partial x} = 0$$

▷ 壁面邊界:

$$u = 0 \quad , \quad v = 0$$

所設計物理域的網格為複雜不規則形狀，網格點數為  $121 \times 41$ ，如圖 7.10 所示，利用這組網格所算出來的答案，其數值解與 Erturk [12] 所得在  $x = 3$ ， $x = 7$  以及  $x = 15$  的速度剖面做一比較，結果十分的符合，因此藉由後向階梯流問題，可達成程式驗證之目的。



#### 7.1.4 Poisson-Nernst-Planck (PNP) 方程組之實解驗證

在進行物理問題的模擬前，吾人針對電方程組進行實解之驗證，及針對Poisson-Nernst-Planck 方程組，以及一描述外加電場的Laplace進行實解的驗證。假設各項物理量的實解為：

$$n_+ = \frac{-2(1+y)}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.4)$$

$$n_- = \frac{-2(1+y)}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.5)$$

$$\psi = \frac{-2}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.6)$$

$$\phi = \frac{-2}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.7)$$

各個物理量的邊界條件皆使用Dirichlet type邊界條件。

##### 7.1.3.1 均勻網格轉換到均勻網格之實解驗證

爲了驗證程式的正確性以及測試空間上的收斂斜率，因此網格是使用均勻網格轉至均勻網格的方式，並在不同網格數下進行計算；物理域和計算域爲 $(0 \leq x, y \leq 1), (0 \leq \xi, \eta \leq 1)$ ；計算後的結果與實解之誤差(採用 $L_2$  norm)，如表7.2所示，可知空間上的收斂斜率 $n_+$ 、 $n_-$ 、 $\psi$ 與 $\phi$ 均達到近理論四階之準確性。

##### 7.1.3.2 非均勻網格轉換到均勻網格之實解驗證

爲了驗證將非均勻網格轉換到均勻網格以求解Poisson-Nernst-Planck程式的正確性，因此將曲線外型網格轉換到對應的正交網格以進行計算，其中均勻網格的範圍爲 $0 \leq \xi, \eta \leq 1$ ，本文分別測試了邊界爲波浪形狀的網格和扇形，計算結果和實解之比較如圖7.13、7.14、所示，它們都和實解呈相當好的符合性。



### 7.1.5 PNP-NS 方程組之實解驗證

在分別做過NS和PNP方程組中個別的驗證後，吾人針對PNP與NS相互耦合之方程進行驗證，假設個物理量的實解為：

$$n_+ = \frac{-2(1+y)}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.8)$$

$$n_- = \frac{-2(1+y)}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.9)$$

$$\psi = \frac{-2}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.10)$$

$$\phi = \frac{-2}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.11)$$

$$u = \frac{-2(1+y)}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.12)$$

$$v = \frac{2(1+x)}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.13)$$

$$p = \frac{-2}{(1+x)^2 + (1+y)^2} \quad (7.14)$$

壓力 $p$ 的邊界條件是給動量方程(Neumann type)，其他物理量的邊界條件皆使用Dirichlet type邊界條件。

爲了驗證程式的正確性以及測試解在空間上的收斂斜率，因此網格使用均勻網格轉至均勻網格的方式，並在不同網格數下進行計算；物理域和計算域爲 $(0 \leq x, y \leq 1), (0 \leq \xi, \eta \leq 1)$ ；計算的結果與實解之誤差(採用 $L_2$  norm)，如圖7.15所示，可知空間上的收斂斜率 $n_+$ 、 $n_-$ 、 $\psi$ 、 $\phi$ 、 $u$ 、 $v$ 與 $p$ 如前述的結果均可達到近理論四階之準確性。



## 7.2 數值驗證之結果

Grid	$10^2$	$16^2$	$20^2$	$25^2$
$u$	$1.608 \times 10^{-6}$	$2.200 \times 10^{-7}$	$9.275 \times 10^{-8}$	$4.139 \times 10^{-8}$
$v$	$1.635 \times 10^{-6}$	$2.220 \times 10^{-7}$	$9.331 \times 10^{-8}$	$4.151 \times 10^{-8}$
$p$	$1.208 \times 10^{-4}$	$1.966 \times 10^{-5}$	$8.486 \times 10^{-6}$	$3.749 \times 10^{-6}$

表 7.1: 二維Navier-Stokes方程組在不同網格大小之結果。

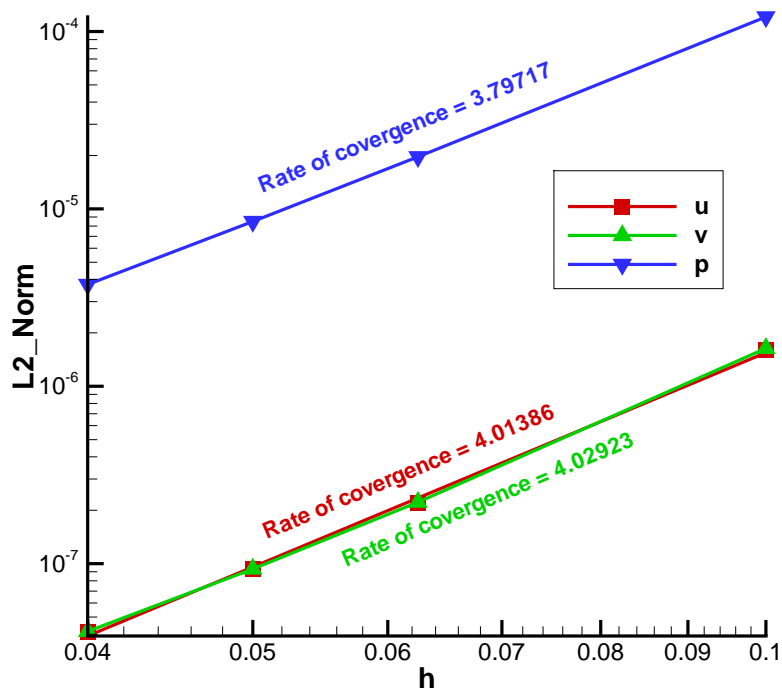
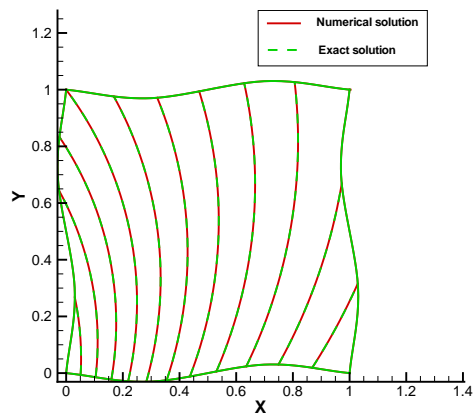
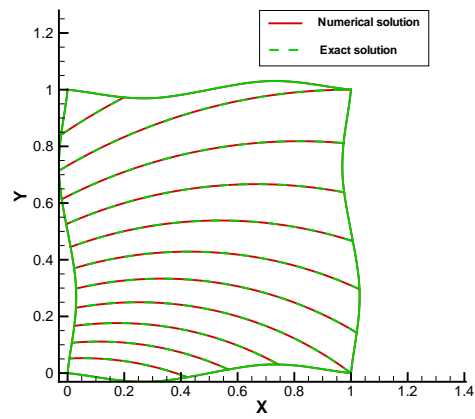


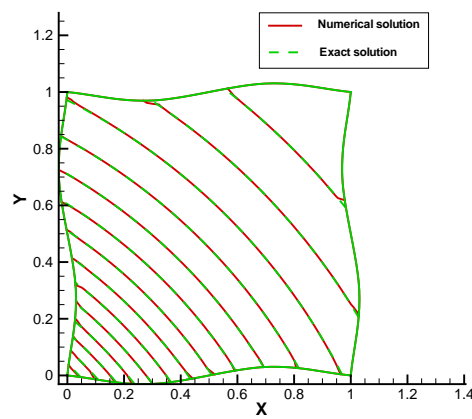
圖 7.3: 圖示二維實解Navier-Stokes方程組解的收斂斜率



(a)

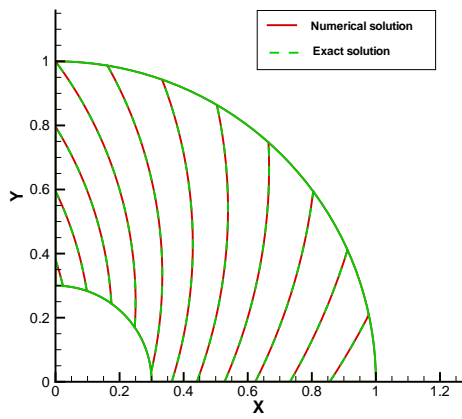


(b)

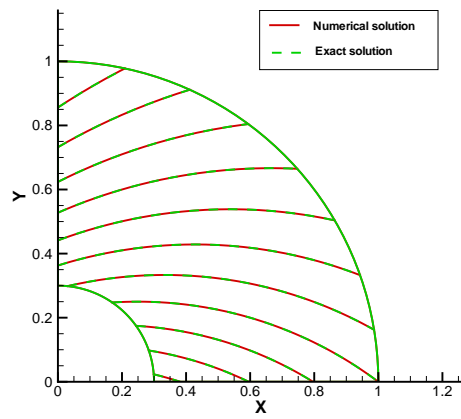


(c)

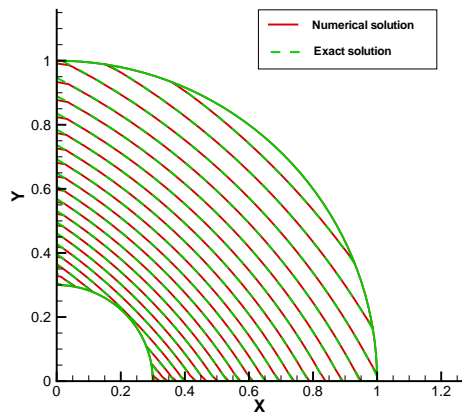
圖 7.4: 二維Navier-Stokes方程組速度與壓力之實解與數值解之比較圖。 (a)  $u$ ; (b)  $v$ ; (c)  $p$



(a)

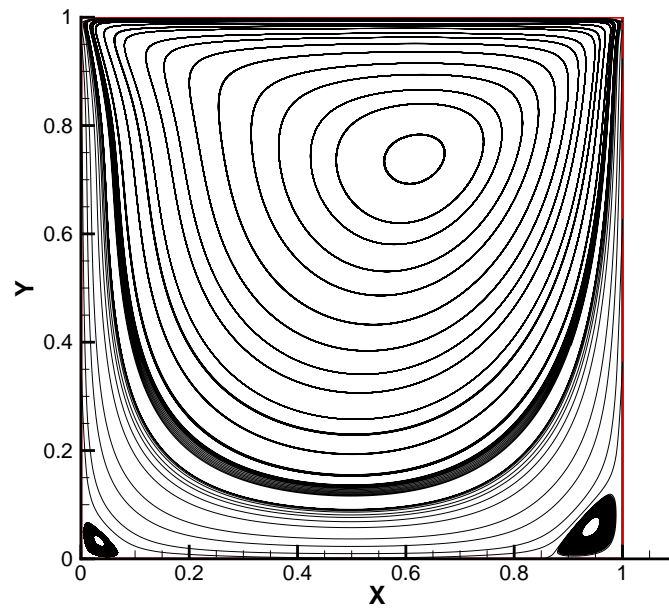


(b)



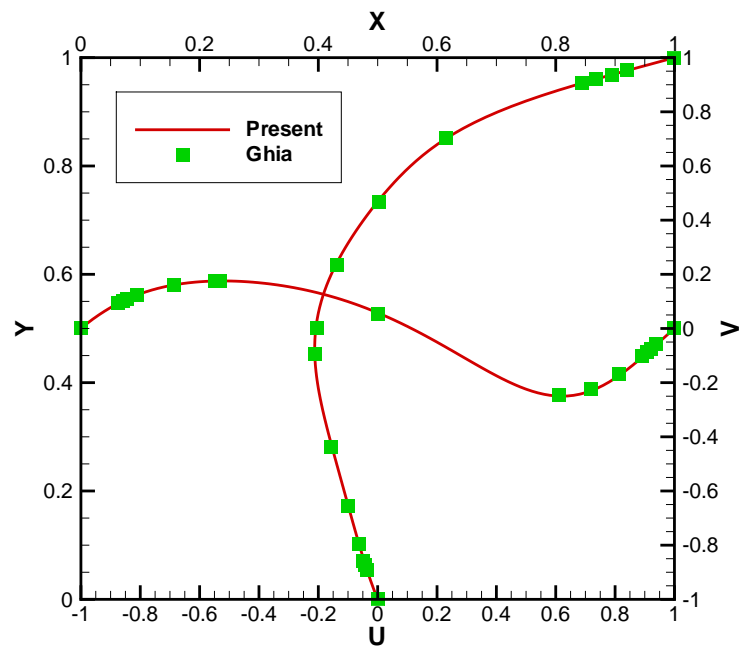
(c)

圖 7.5: 二維Navier-Stokes方程組速度與壓力之實解與數值解之比較圖。 (a)  $u$ ; (b)  $v$ ; (c)  $p$



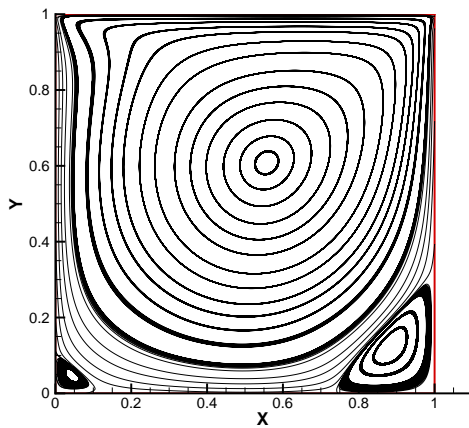
(a)

圖 7.6: 二維拉穴流場在  $Re = 100$  時之流線分佈圖。

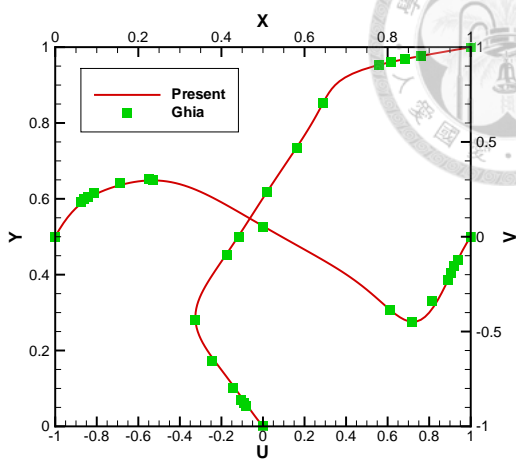


(a)

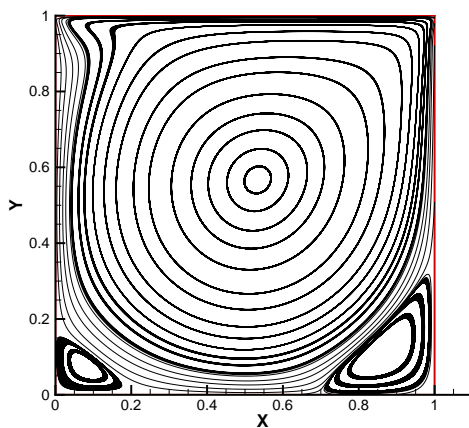
圖 7.7: 二維拉穴流場在  $Re = 100$  時與文獻 [11] 的中心線速度剖面圖之比較。



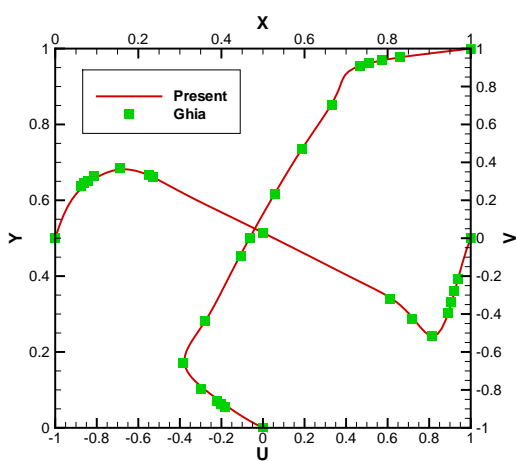
(a)



(b)

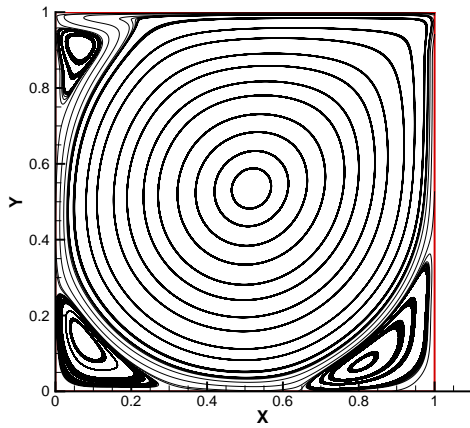


(c)

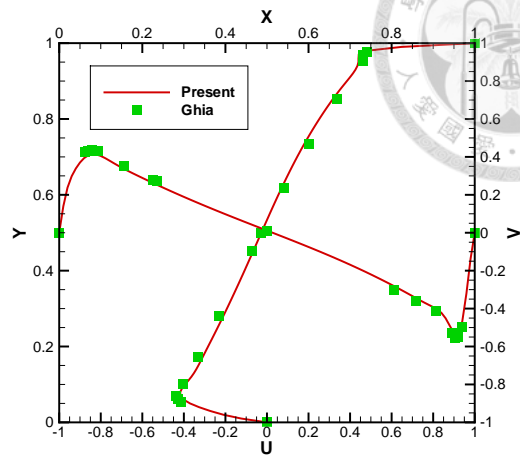


(d)

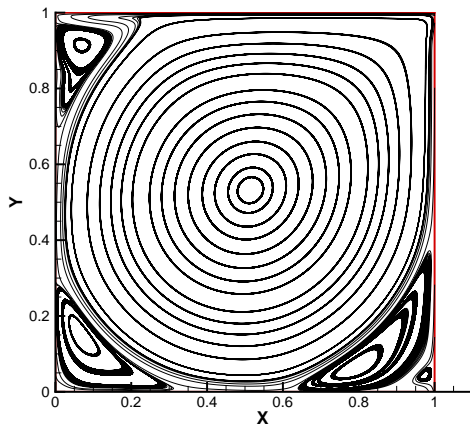
圖 7.8: 二維拉穴流場之流線分佈圖與文獻 [11] 的中心線速度剖面圖之比較。(a)  $Re = 400$ ; (b)  $Re = 400$ ; (c)  $Re = 1000$ ; (d)  $Re = 1000$



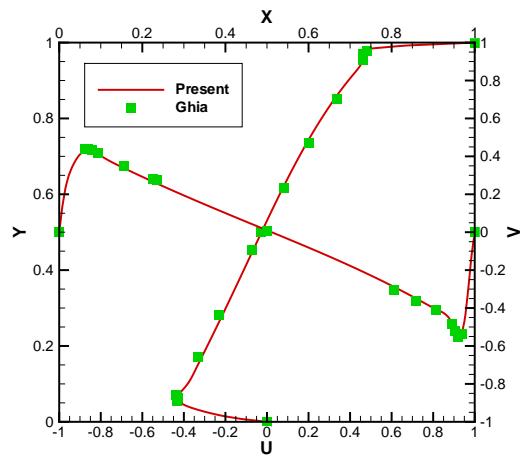
(a)



(b)

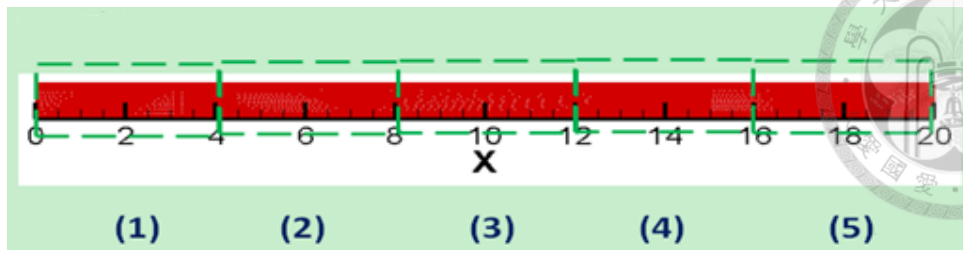


(c)

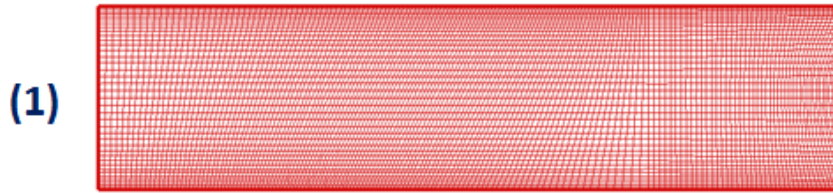


(d)

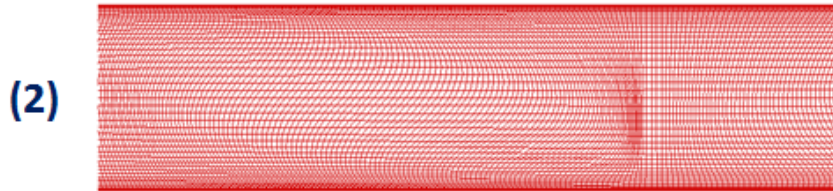
圖 7.9: 二維拉穴流場之流線分佈圖與文獻 [11] 的中心線速度剖面圖之比較。(a)  $Re = 5000$ ; (b)  $Re = 5000$ ; (c)  $Re = 7500$ ; (d)  $Re = 7500$



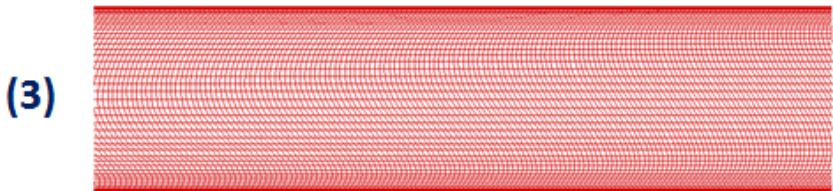
(a)



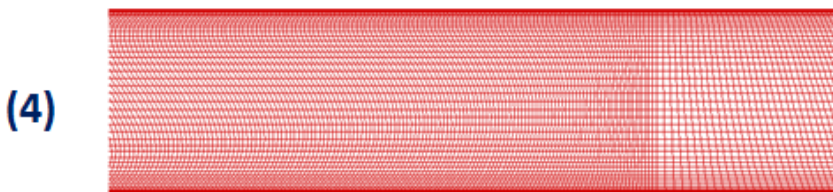
(b)



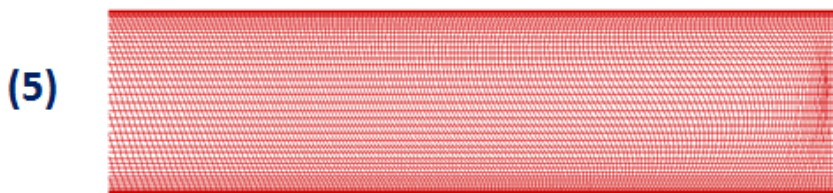
(c)



(d)

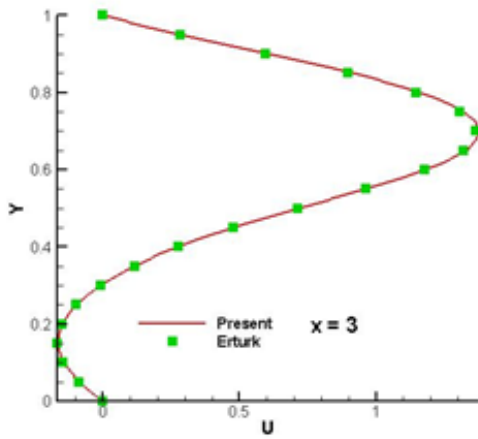


(e)

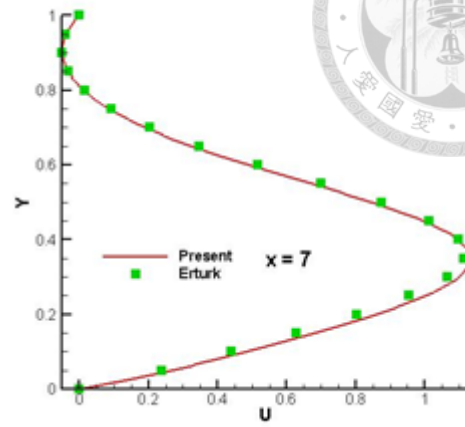


(f)

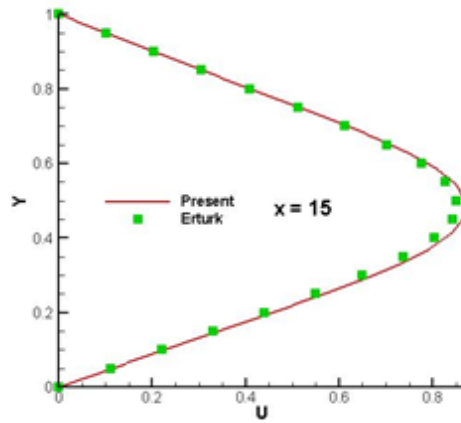
圖 7.10: 二維後向階梯流問題之不規則物理域網格及其放大圖。



(a)



(b)



(c)

圖 7.11: 二維後向階梯流之速度剖面圖與文獻 [12]之比較。(a)  $x = 3$ ; (b)  $x = 7$ ; (c)  $x = 15$

Grid	$10^2$	$16^2$	$20^2$	$25^2$
$n_+$	$6.943 \times 10^{-7}$	$8.805 \times 10^{-8}$	$3.735 \times 10^{-8}$	$2.099 \times 10^{-8}$
$n_-$	$1.523 \times 10^{-6}$	$1.596 \times 10^{-7}$	$6.315 \times 10^{-8}$	$4.663 \times 10^{-8}$
$\psi$	$1.148 \times 10^{-6}$	$1.550 \times 10^{-7}$	$5.912 \times 10^{-8}$	$2.219 \times 10^{-8}$
$\phi$	$1.179 \times 10^{-6}$	$1.569 \times 10^{-7}$	$5.996 \times 10^{-8}$	$2.298 \times 10^{-8}$

表 7.2: 二維具實解之Poisson-Nernst-Planck方程組在不同網格大小的計算結果。

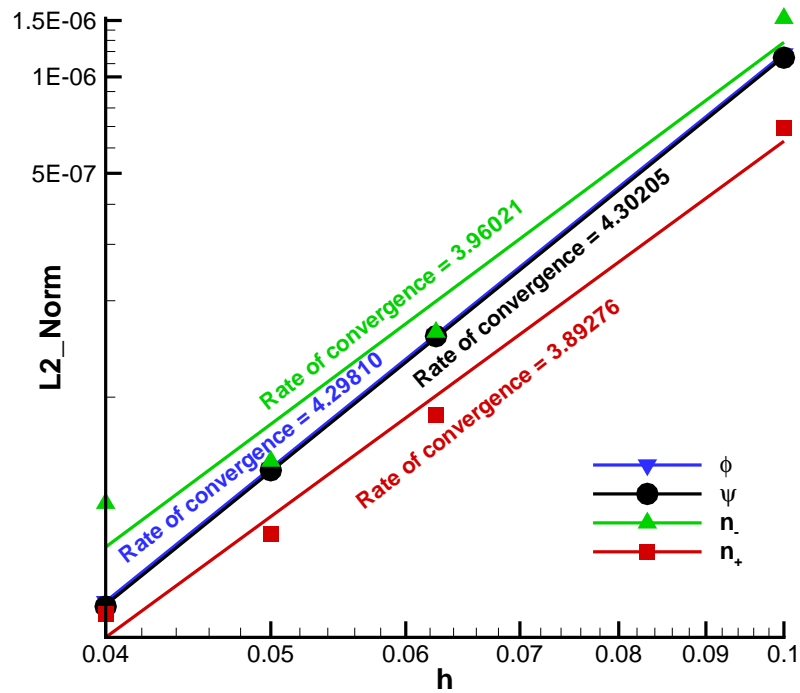
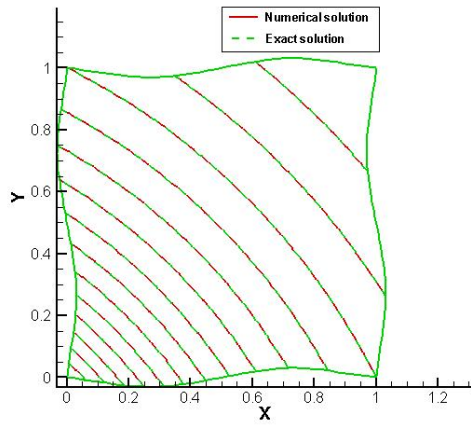
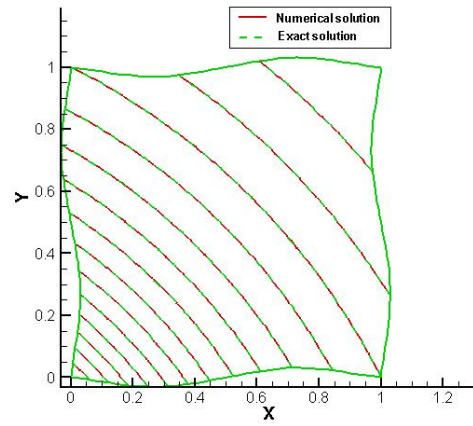


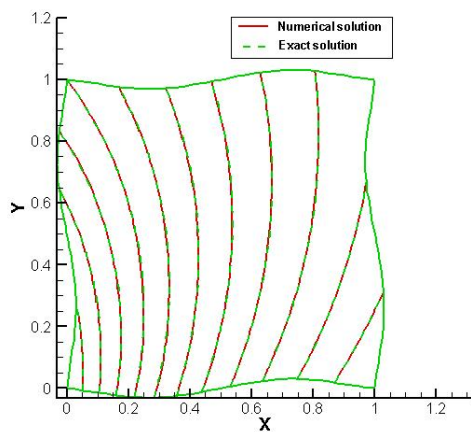
圖 7.12: 圖示二維具實解之Poisson-Nernst-Planck方程組解的收斂斜率



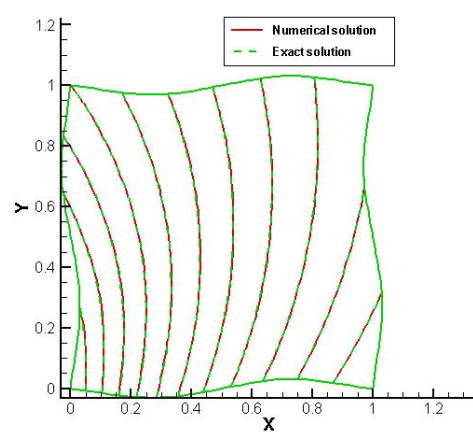
(a)



(b)

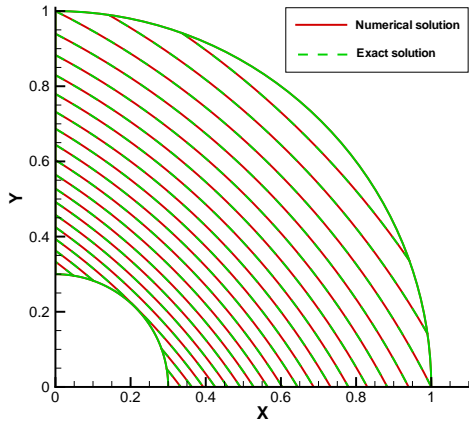


(c)

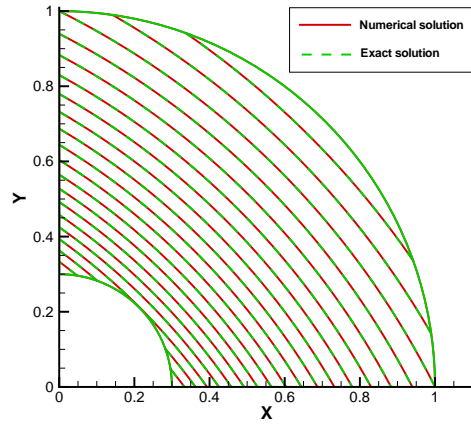


(d)

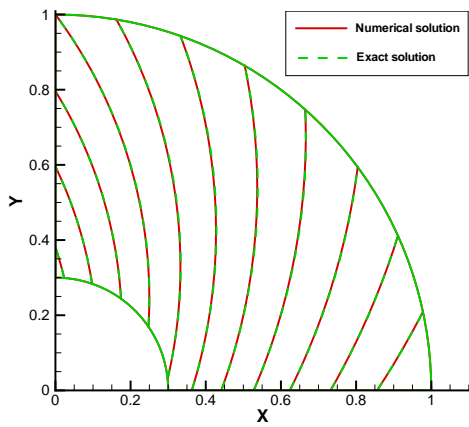
圖 7.13: 二維Poisson-Nernst-Planck方程組之實解與數值解之比較圖。(a)  $\phi$ ; (b)  $\psi$ ; (c)  $n_-$ ; (d)  $n_+$



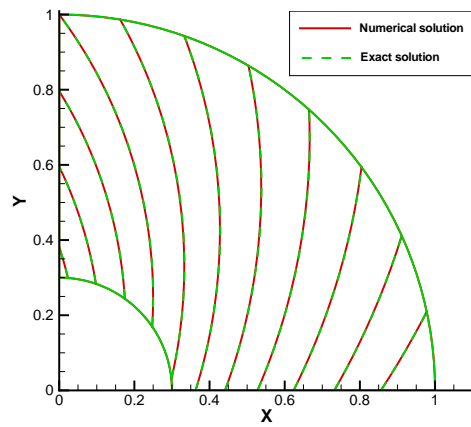
(a)



(b)

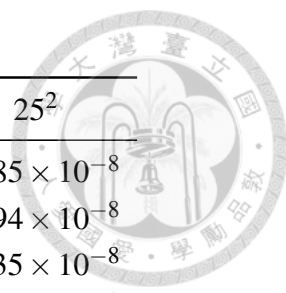


(c)



(d)

圖 7.14: 二維Poisson-Nernst-Planck方程組之實解與數值解之比較圖。 (a)  $\phi$ ; (b)  $\psi$ ; (c)  $n_-$ ; (d)  $n_+$



Grid	$10^2$	$16^2$	$20^2$	$25^2$
$n_+$	$7.350 \times 10^{-7}$	$8.754 \times 10^{-8}$	$3.246 \times 10^{-8}$	$1.285 \times 10^{-8}$
$n_-$	$1.421 \times 10^{-6}$	$1.503 \times 10^{-7}$	$5.113 \times 10^{-8}$	$1.794 \times 10^{-8}$
$\psi$	$1.149 \times 10^{-6}$	$1.561 \times 10^{-7}$	$6.029 \times 10^{-8}$	$2.335 \times 10^{-8}$
$\phi$	$1.179 \times 10^{-6}$	$1.569 \times 10^{-7}$	$5.996 \times 10^{-8}$	$2.298 \times 10^{-8}$
$u$	$8.953 \times 10^{-6}$	$1.063 \times 10^{-6}$	$3.815 \times 10^{-7}$	$1.344 \times 10^{-7}$
$v$	$9.551 \times 10^{-6}$	$1.090 \times 10^{-6}$	$3.826 \times 10^{-7}$	$1.319 \times 10^{-7}$
$p$	$3.418 \times 10^{-4}$	$5.064 \times 10^{-5}$	$2.015 \times 10^{-5}$	$7.883 \times 10^{-6}$

表 7.3: 二維具實解之Poisson-Nernst-Planck方程組在不同網格大小的計算結果。

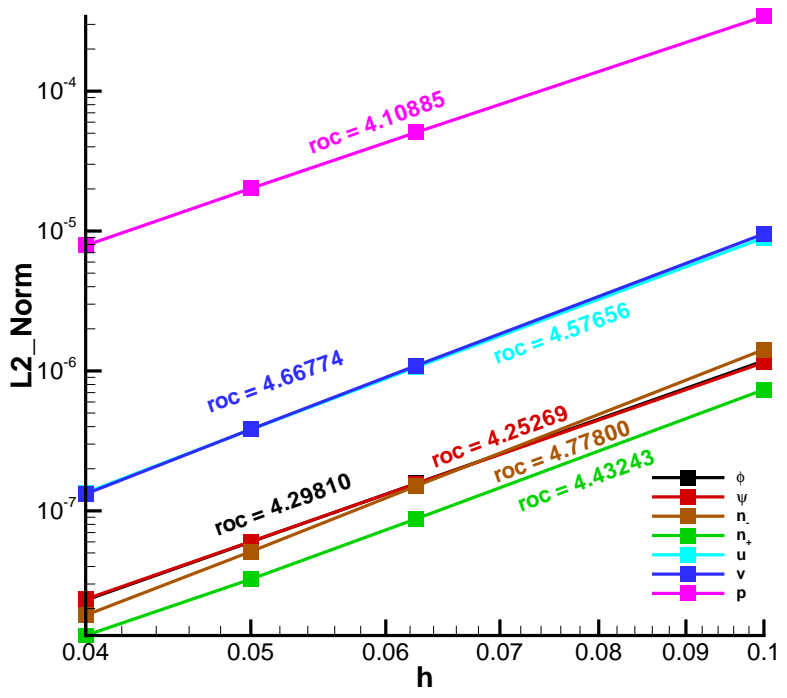


圖 7.15: 圖示二維具實解之PNP-NS方程組解的收斂斜率



## 第八章

# 仿離子通道之數值模擬

### 8.1 問題之描述

本章節是利用Navier-Stokes方程組和Poisson-Nernst-Planck方程組模擬二維電滲流體在仿離子通道內之流動。計算分別執行于仿平行離子通道和曲線離子通道內，以觀測在不同外型仿離子通道內之物理行為；接著，將模擬離子濃度從細胞內部經由離子通道往細胞外部移動之現象。

#### 8.1.1 參數設定

壁面電位勢 $\zeta_0 = -25mV$ ；外加電場為 $E_x = 100kV/m$ ；管內之流體為NaCl電解溶液，其溶液密度為 $\rho = 1000kg/m^3$ ；莫耳濃度 $C_0 = 5 \times 10^{-5}M$ ；靜黏滯係數 $\mu = 0.91 \times 10^{-3}kg/ms$ ；管寬 $H = 20 \times 10^{-6}m$ ；溫度為 $T_{ref} = 300K$ ；介電常數 $\epsilon = 80$ 。



## 8.2 二維電滲流之流場分析

### 8.2.1 計算模型之初始與邊界條件

如圖8.1所示，壁面電位為 $\zeta_0 = -25mV$ ，在入口處施加一電位 $\phi_{in} = 8V$ ，在右方出口處 $\phi_{out} = 0V$ 。管寬為 $H$ 並設定為 $20 \times 10^{-6}m$ ，管寬( $H$ )與管長( $L$ )之比為1:4；初始條件與邊界條件分別整理如下：

平行管流道初始條件：

$$\phi = 0; \psi = 0; u = 0; v = 0; p = 0; n_+ = \exp(-\zeta_0); n_- = \exp(\zeta_0),$$

平行管流道邊界條件：

● 入口處( $x = 0$ ):

$$\phi = \phi_{in}; \psi = 0; \frac{\partial u}{\partial x} = 0; \frac{\partial v}{\partial x} = 0; \frac{\partial p}{\partial \xi} = \frac{B\eta_x - A\eta_y}{\xi_y\eta_x - \xi_x\eta_y}; \frac{\partial n_+}{\partial x} = 0; \frac{\partial n_-}{\partial x} = 0$$

● 出口處( $x = 4$ ):

$$\phi = \phi_{out}; \psi = 0; \frac{\partial u}{\partial x} = 0; \frac{\partial v}{\partial x} = 0; \frac{\partial p}{\partial \xi} = \frac{B\eta_x - A\eta_y}{\xi_y\eta_x - \xi_x\eta_y}; \frac{\partial n_+}{\partial x} = 0; \frac{\partial n_-}{\partial x} = 0$$

● 下壁面( $y = 0$ ):

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0; \psi = \zeta_0; u = 0; v = 0; \frac{\partial p}{\partial \eta} = \frac{A\xi_y - B\eta_x}{\xi_y\eta_x - \xi_x\eta_y}; n_+ = e^{-\zeta_0}; n_- = e^{\zeta_0}$$

● 上壁面( $y = 1$ ):

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0; \psi = \zeta_0; u = 0; v = 0; \frac{\partial p}{\partial \eta} = \frac{A\xi_y - B\eta_x}{\xi_y\eta_x - \xi_x\eta_y}; n_+ = e^{-\zeta_0}; n_- = e^{\zeta_0}$$

其中

$$A = -\frac{\partial u}{\partial t} - U\frac{\partial u}{\partial \xi} - V\frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{1}{Re}\nabla^2 u + \frac{n_0 e \zeta_0}{\rho U_0^2}(n_- - n_+)(\xi_x \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \xi_x \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial \phi}{\partial \eta})$$

$$B = -\frac{\partial v}{\partial t} - U\frac{\partial v}{\partial \xi} - V\frac{\partial v}{\partial \eta} + \frac{1}{Re}\nabla^2 v + \frac{n_0 e \zeta_0}{\rho U_0^2}(n_- - n_+)(\xi_y \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \xi_y \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial \phi}{\partial \eta})$$



曲線管流道初始條件：

$$\phi = 0; \psi = 0; u = 0; v = 0; p = 0; n_+ = \exp(-\zeta_0); n_- = \exp(\zeta_0),$$

曲線管流道邊界條件：

• 入口處( $x = 0$ ):

$$\phi = \phi_{in}; \psi = 0; \frac{\partial u}{\partial x} = 0; \frac{\partial v}{\partial x} = 0; \frac{\partial p}{\partial \xi} = \frac{B\eta_x - A\eta_y}{\xi_y\eta_x - \xi_x\eta_y}; \frac{\partial n_+}{\partial x} = 0; \frac{\partial n_-}{\partial x} = 0$$

• 出口處( $x = 4$ ):

$$\phi = \phi_{out}; \psi = 0; \frac{\partial u}{\partial x} = 0; \frac{\partial v}{\partial x} = 0; \frac{\partial p}{\partial \xi} = \frac{B\eta_x - A\eta_y}{\xi_y\eta_x - \xi_x\eta_y}; \frac{\partial n_+}{\partial x} = 0; \frac{\partial n_-}{\partial x} = 0$$

• 下壁面( $y = 0$ ):

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0; \psi = \zeta_0; u = 0; v = 0; \frac{\partial p}{\partial \eta} = \frac{A\xi_y - B\eta_x}{\xi_y\eta_x - \xi_x\eta_y}; n_+ = e^{-\zeta_0}; n_- = e^{\zeta_0}$$

• 上壁面( $y = 1$ ):

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0; \psi = \zeta_0; u = 0; v = 0; \frac{\partial p}{\partial \eta} = \frac{A\xi_y - B\eta_x}{\xi_y\eta_x - \xi_x\eta_y}; n_+ = e^{-\zeta_0}; n_- = e^{\zeta_0}$$

其中

$$A = -\frac{\partial u}{\partial t} - U\frac{\partial u}{\partial \xi} - V\frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{1}{Re}\nabla^2 u + \frac{n_0 e^{\zeta_0}}{\rho U_0^2}(n_- - n_+)(\xi_x \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \xi_x \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial \phi}{\partial \eta})$$

$$B = -\frac{\partial v}{\partial t} - U\frac{\partial v}{\partial \xi} - V\frac{\partial v}{\partial \eta} + \frac{1}{Re}\nabla^2 v + \frac{n_0 e^{\zeta_0}}{\rho U_0^2}(n_- - n_+)(\xi_y \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \xi_y \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial \phi}{\partial \eta})$$

爲了得以觀察電滲流在不同微流管道中的流動情形，上述的參數將分別應用於平行微流管道和曲線微流管道 [19] 的問題，並進行計算。如圖 8.3、8.4 所示，網格數爲  $41 \times 21$ ，採用非均勻的網格進行計算。在發生電雙層的壁面附近加密網格，如此可大幅地減少計算時間，並可應用於其他具複雜外型問題的計算。

在計算完平行微流管道與曲線微流管的問題後，接著模擬了離子通道流的問題，如圖 8.5 所示，並將此問題分爲問題一及問題二，如圖 8.6 及圖 8.7 所示。

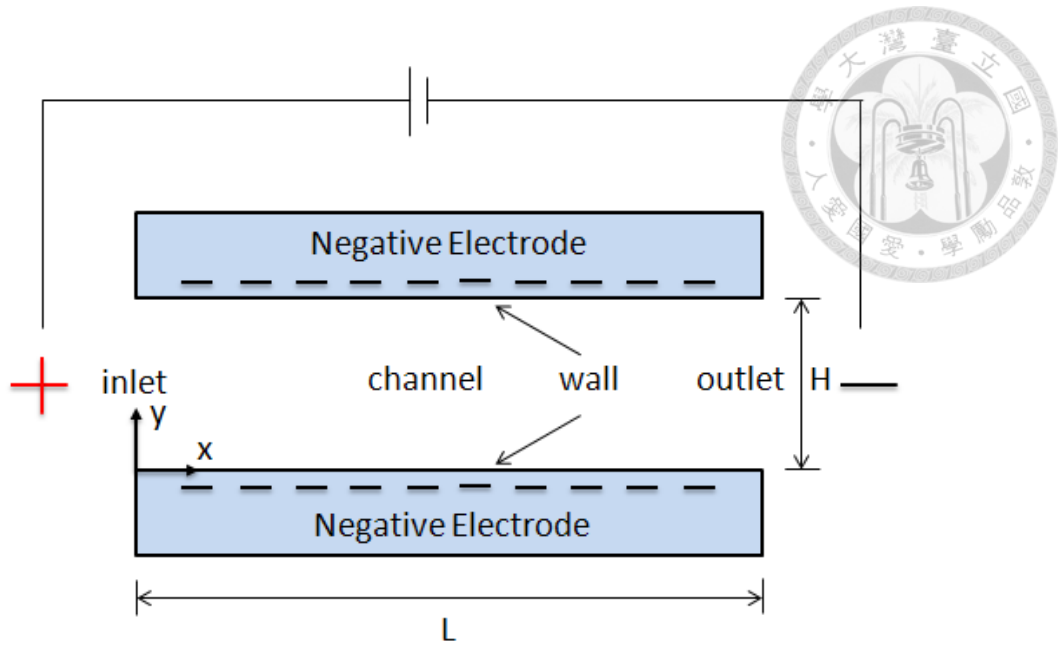


圖 8.1: 二維電滲流離子通道物理模型之示意圖。

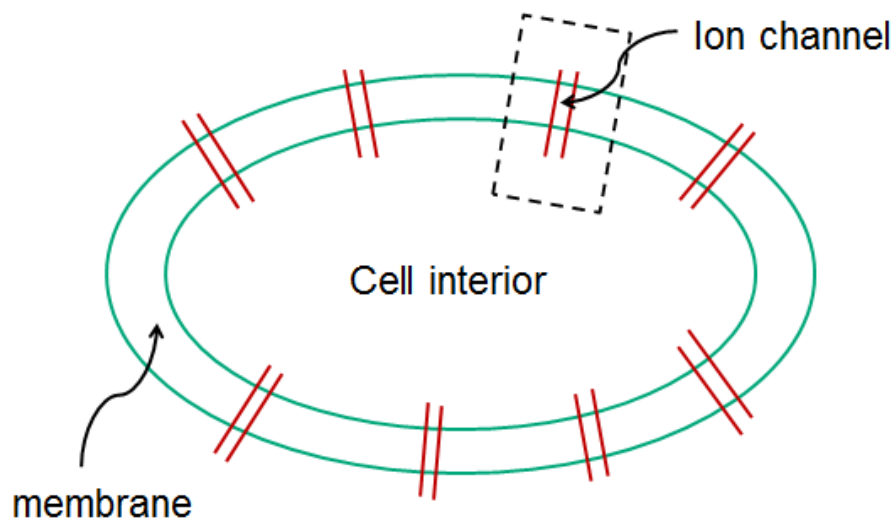


圖 8.2: 細胞膜上離子通道之示意圖。

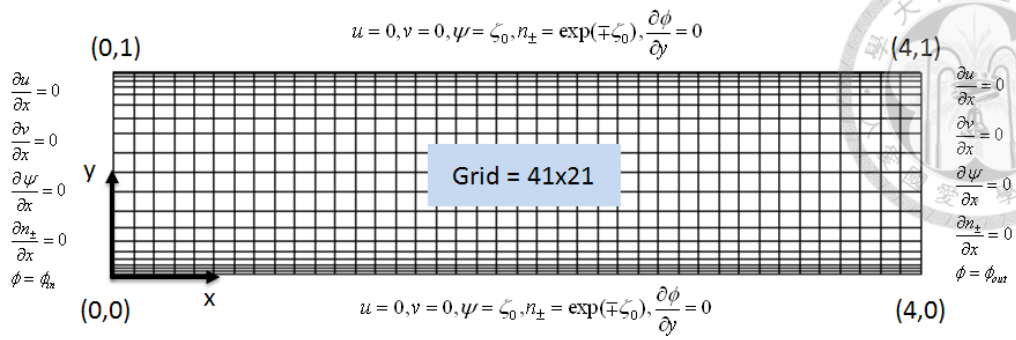


圖 8.3: 二維電滲流于平行流道內的計算區域示意圖。

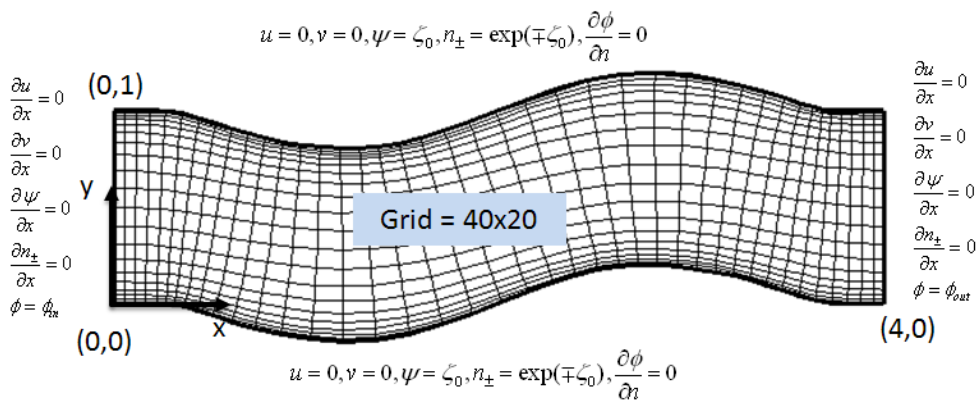


圖 8.4: 二維電滲流于曲線流道內的計算區域示意圖。

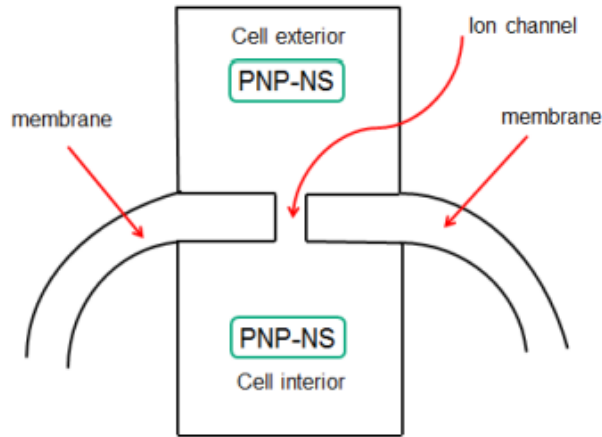


圖 8.5: 離子通道流之示意圖。

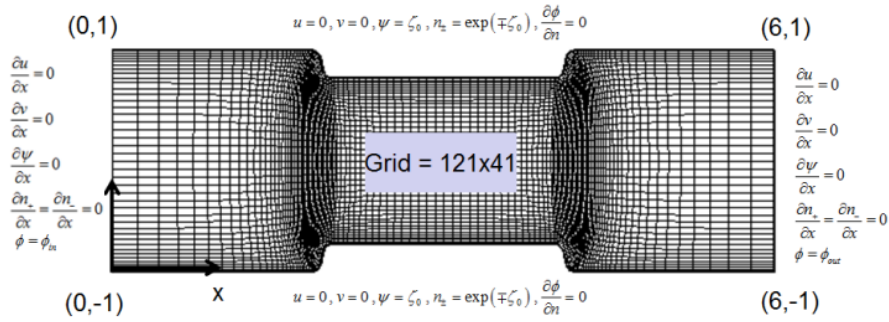


圖 8.6: 離子通道流問題一。

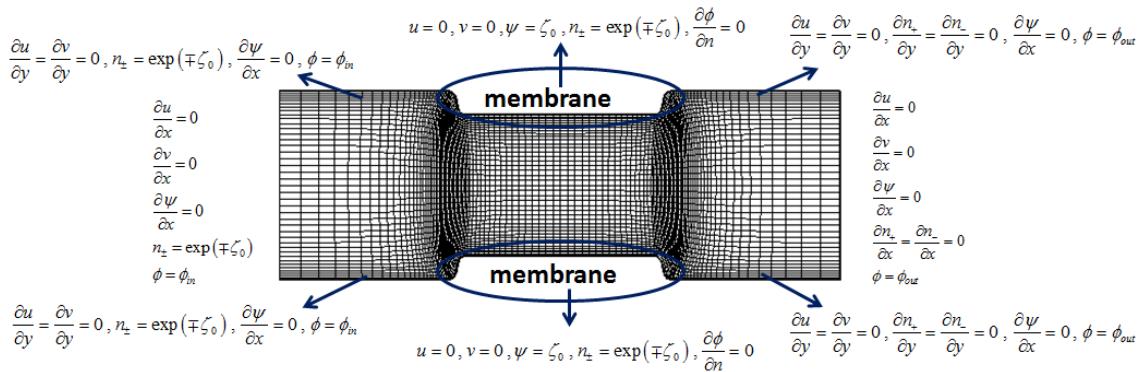


圖 8.7: 離子通道流問題二。



## 8.2.2 討論

首先，比較電滲力驅動流（EOF）與壓力驅動流的不同，其比較的基準為在相同物理域下，分別計算PNP-NS方程與NS方程，由圖8.8可知，在平行板的微流道中，傳統壓力驅動的速度剖面呈現拋物線的形式，由電滲力所驅動的速度剖面呈現瓶塞蓋的形式；電滲力驅動流的壓力分布和傳統壓力驅動流的壓力分布最大的不同處如下：傳統壓力驅動流是源於由管道前、後壓差所形成的推動力，因此壓力在 $y$ 方向上幾乎沒有變化；由於電滲力驅動的流體會在壁面處形成電雙層，因此在管壁處會有壓力變大的情形，在接近管壁中央處的壓力則無明顯的變化，如圖8.9所示。而電滲流在平行流道中，其速度剖面隨著時間推進的變化如圖8.10所示，可以發現當最後達到完全發展流時，速度剖面呈現一瓶塞蓋狀均勻流的形式；圖8.11及圖8.12則是畫出七個物理量的等高線分布圖，可以看到由於上下極板帶負電，故正離子濃度最大為靠近極板處；反之，負離子會被極板所排斥，故負離子濃度最小為靠近極板處；速度方面，從 $u$ 的分布來看可以發現在中間處幾乎呈現均勻流狀態，由於流動為從左端入口處流進，右端出口處流出，故所計算出來速度 $v$ 的值非常趨近於零，而壓力剖面由於上下受到電雙層影響，其變化較明顯，另外在圖8.13與圖8.14以及圖8.23與圖8.24分別畫出於平行流道和曲線流道速度向量與流線圖，可以看到流動方向從左邊入口端流進，然後隨著外型的改變，從右邊出口流出的情形。

平板中電滲力驅動流主要是受到電滲力驅動的影響，壓力梯度幾乎對速度沒有影響，即主要的外力項是來自庫倫力；而壁面電位對庫倫力的影響並不明顯，主要是由外加電場所主導的庫倫力形成的。圖8.16繪出離子的對流、擴散、遷移對離子濃度的影響，其中微流道的的上、下壁面為負極，正離子在靠近壁面處之濃度最大，正離子的離子遷移力最大，正離子濃度主要由離子遷移力所影響；反之，負離子在靠近壁面處之濃度為最低，所以負離子的遷移力在電雙層內並不明顯，影響負離子分布的主要是源自離子的擴散項。同時，本文亦比較正、負離子遷移力的剖面圖。由於壁面帶負電，所以越接近壁面時，正離子離子遷移力越大；而負離子的離子遷移力的最大處發生在Debye layer附近。定義Stern layer 厚度為一個離子半徑，以及定義擴散層為電位為 $1/e$ 的位置，可建構出圖8.17所示的電雙層模型 [17]。

爲了比較電動驅動流在平行流道和曲線流道中的不同，使用兩種不同求解壓力的方法，並分別繪出平行流道於 $x = 2$ 處之速度 $u$ 、 $v$ 及壓力 $p$ 的剖面圖，如圖8.18、8.19及8.20所示；和曲線流道於 $x = 1.2$ 、 $x = 2$ 、 $x = 2.8$ 處之速度 $u$ 、 $v$ 及壓力 $p$ 的剖面圖，如圖8.26、8.27、8.28所示；在平行流道中，速度 $v$ 的理論值是0，而由PPE方法與文獻 [13]所計算速度 $v$ 的值都接近理論值；壓力的部分從剖面圖可以觀察到在靠近上下壁面因爲電雙層，所以會有壓力梯度急遽的變化，而曲線通道壓力的分佈圖如圖8.22(c)所示，可以觀察到在靠近壁面的地方壓力變化都較大，因此 $-\partial p/\partial x$ 不再爲零，可以看出在曲線管道 $x = 1.2$ 處上壁面由於受到前、後兩端壓力的影響，在管道的上半部形成一推力，所以流體在上半部之速度較大；反之，下壁面因前、後的壓力差而形成一阻力，所以流體速度較小。

由PPE與文獻 [13]所計算曲線流道在 $x = 1.2$ 、 $x = 2$ 及 $x = 2.8$ 所得到的速度與壓力剖面圖可以得知，在 $x = 2$ 處是通道變化較大的地方，因此速度 $v$ 是有值的，而在 $x = 1.2$ 和 $x = 2.8$ 處，用兩種不同計算壓力的方法所算得之速度 $v$ ，其趨勢是差不多的，由積分三個剖面的流量分別爲1.24967、1.22504及1.25118亦是差不多的，並皆符合質量守恆的條件。而曲線流道在 $x$ 方向的壓力梯度不再爲零，這是因爲原本在平行流道的電滲流，會因指向壁面的庫倫力，在壁面產生相當大的壓力，但當流道外型改變後，Coulomb force則不再只是指向壁面，在某些彎曲的流道反而是指離壁面，因此壁面壓力變小，並形成了壓力差，因此沿 $x$ 方向的壓力梯度將不再爲零，這可說明壓力梯度在曲線流道中，扮演著推力或阻力的原因。

在離子通道流問題中，問題一所使用的邊界條件與平行流道和曲線流道爲同一組，也就是上下爲壁面，左端和右端分別爲入口和出口。如圖8.29所示，速度 $u$ 在通過中間處爲最大，速度 $v$ 則在流道變窄及變寬處的地方有值，也就是說會隨著流道的外型而改變，由圖8.30與圖8.31的速度向量與流線圖，也可以觀察到流動方向會隨著外型變化而變化，接著取九個剖面來積分流量如圖8.32，由左到右分別爲1.608, 1.523, 1.591, 1.618, 1.607, 1.619, 1.592, 1.526, 1.609，是符合質量守恆的。問題二則是欲模擬由細胞內部經由離子通道往細胞外部的流動情形如圖8.34。由圖8.33觀察到，因爲截面積變小，速度 $u$ 在離子通道內的值爲最大，速度 $v$ 在流體經過細胞膜時，其值也有明顯的變化，接著藉由積分離子通道內五個不同剖面的流量，其值分別爲1.308, 1.351, 1.343, 1.358, 1.324，可以知道質量亦是守恆，而由圖8.35與圖8.36的速度向量與流線圖，可以觀察到流動方向與圖8.34相符，有達到所預期的流動情形。

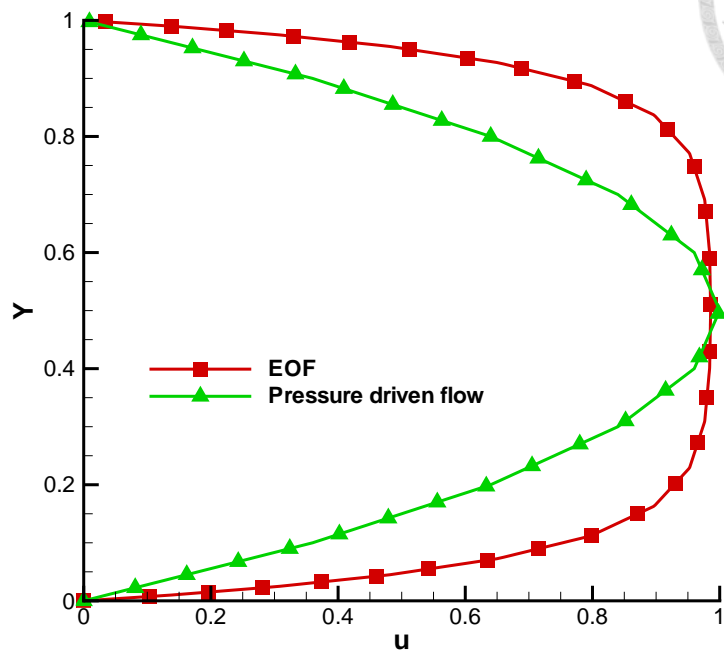


圖 8.8: 比較因壓力驅動流與電滲流所導致的速度剖面圖。

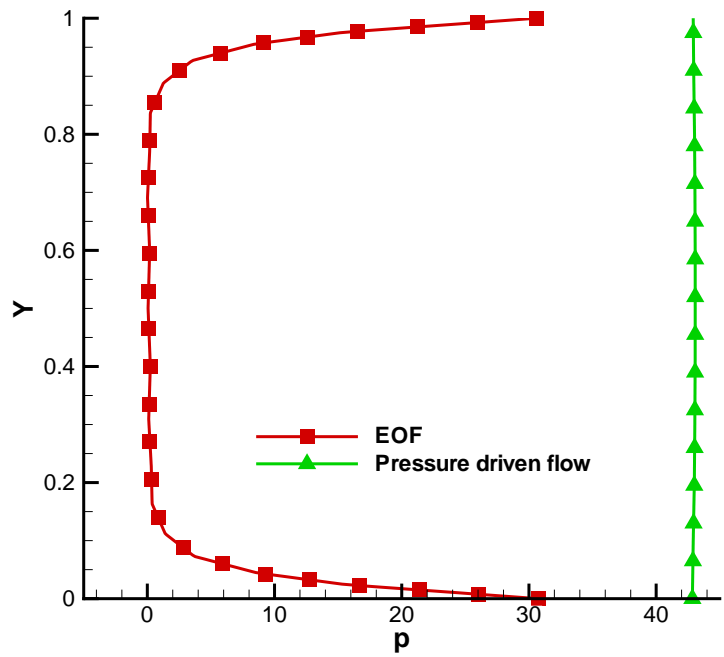


圖 8.9: 比較因壓力驅動流與電滲流所導致的壓力剖面圖。

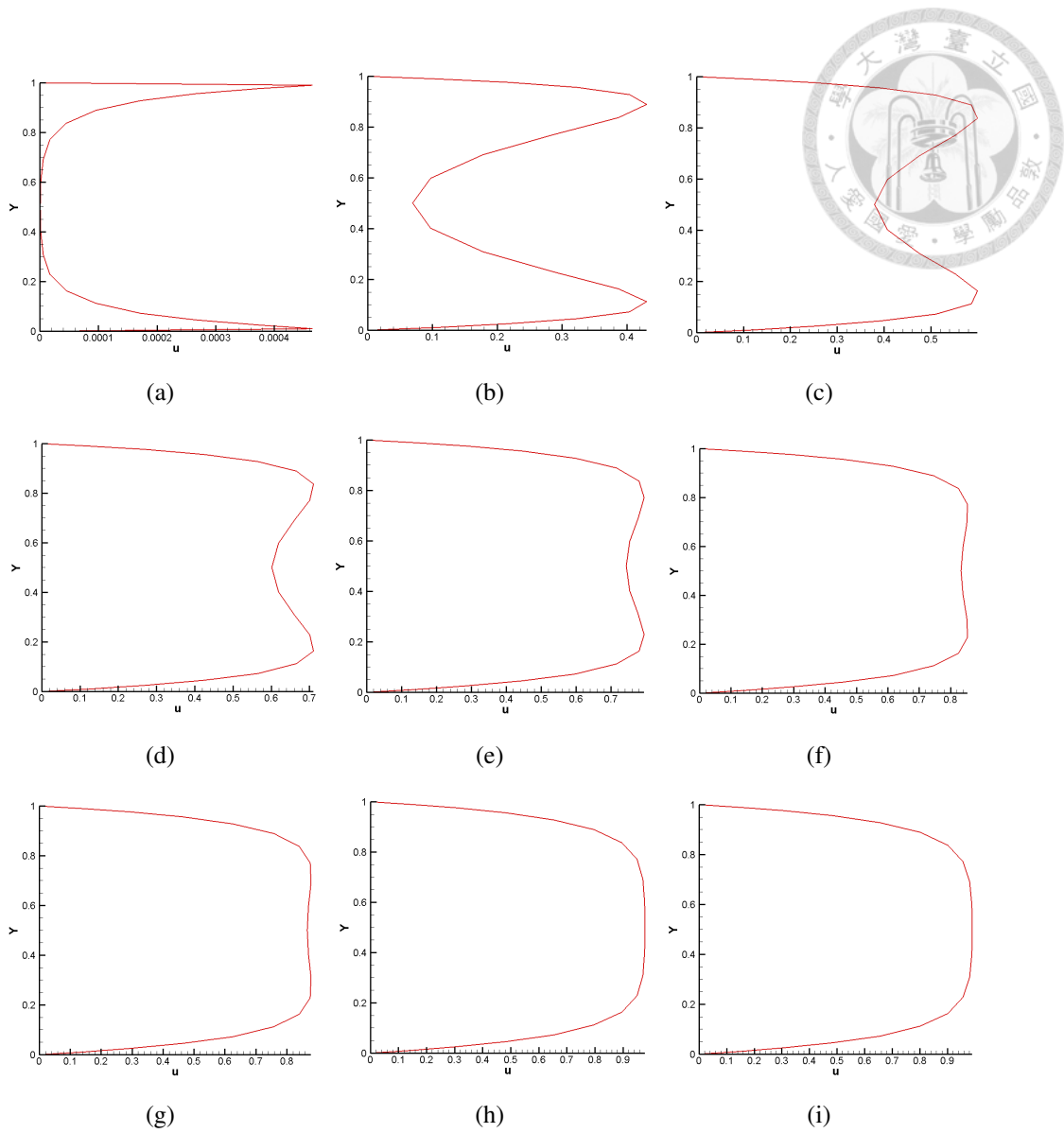
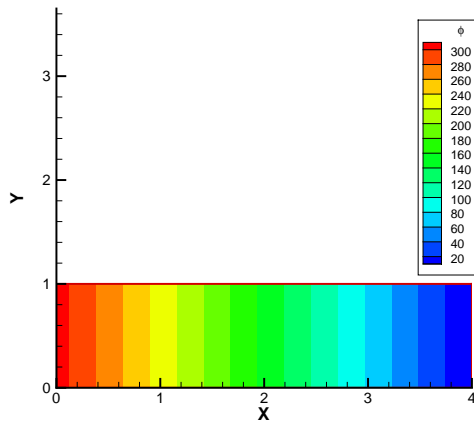
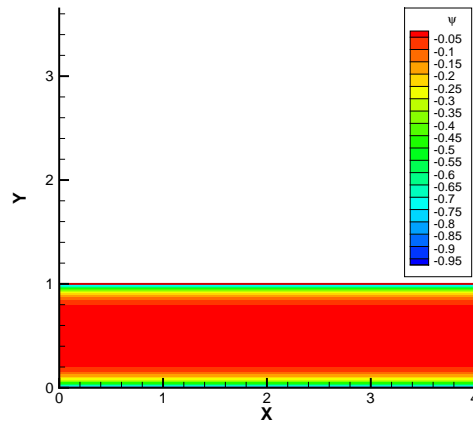


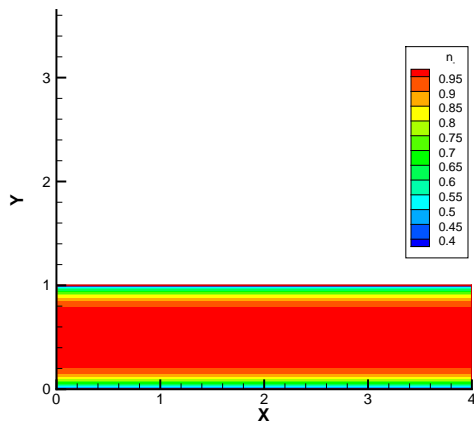
圖 8.10: 電滲流在平行流道中於  $x = 2$  之暫態速度剖面圖。 (a)  $t = 10^{-8}$ ; (b)  $t = 10^{-4}$ ; (c)  $t = 3.0 \times 10^{-4}$ ; (d)  $t = 5.0 \times 10^{-4}$ ; (e)  $t = 7.0 \times 10^{-4}$ ; (f)  $t = 9.0 \times 10^{-4}$ ; (g)  $t = 10^{-3}$ ; (h)  $t = 2.0 \times 10^{-3}$ ; (i)  $t = 3.0 \times 10^{-3}$ 。



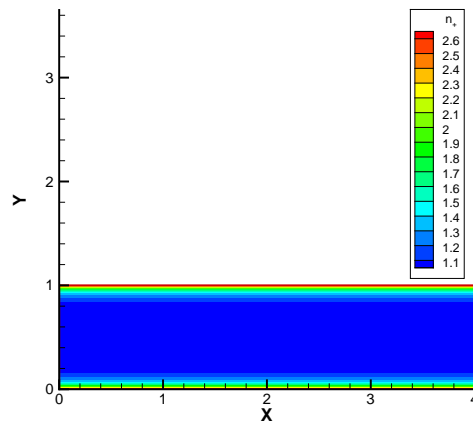
(a)



(b)

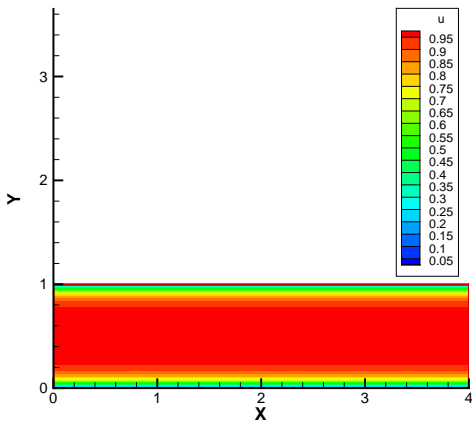


(c)

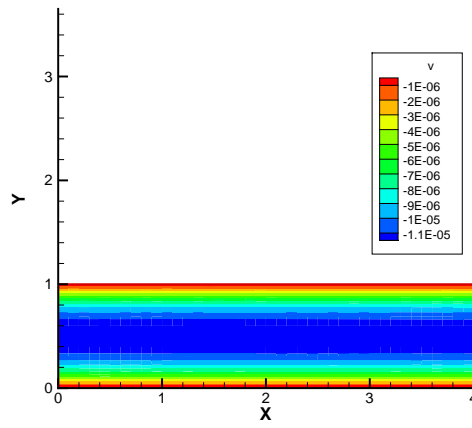


(d)

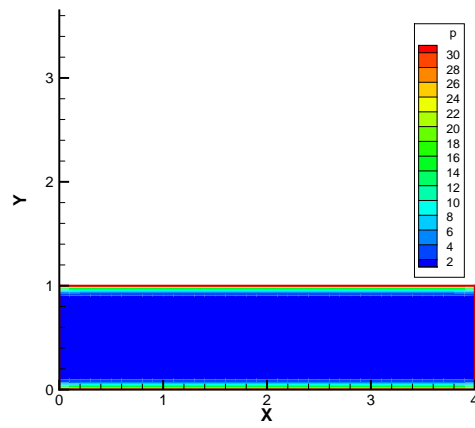
圖 8.11: 平行流道內解的等高分佈圖。 (a)  $\phi$ ; (b)  $\psi$ ; (c)  $n_-$ ; (d)  $n_+$



(a)



(b)



(c)

圖 8.12: 平行流道內解的等高分佈圖。 (a)  $u$ ; (b)  $v$ ; (c)  $p$

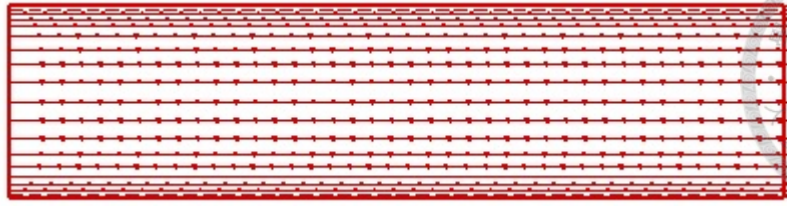
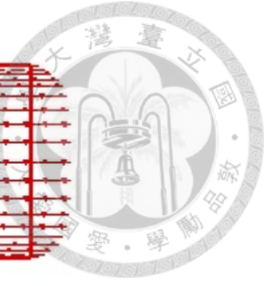


圖 8.13: 平行流道內之速度向量圖。

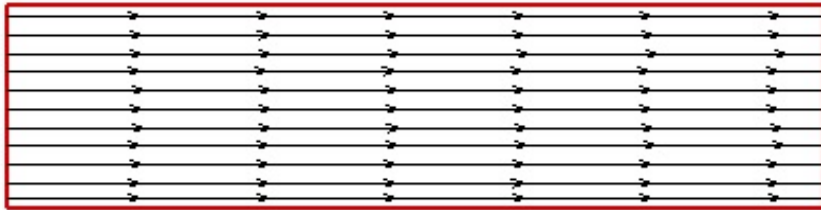


圖 8.14: 平行流道內之流線圖。

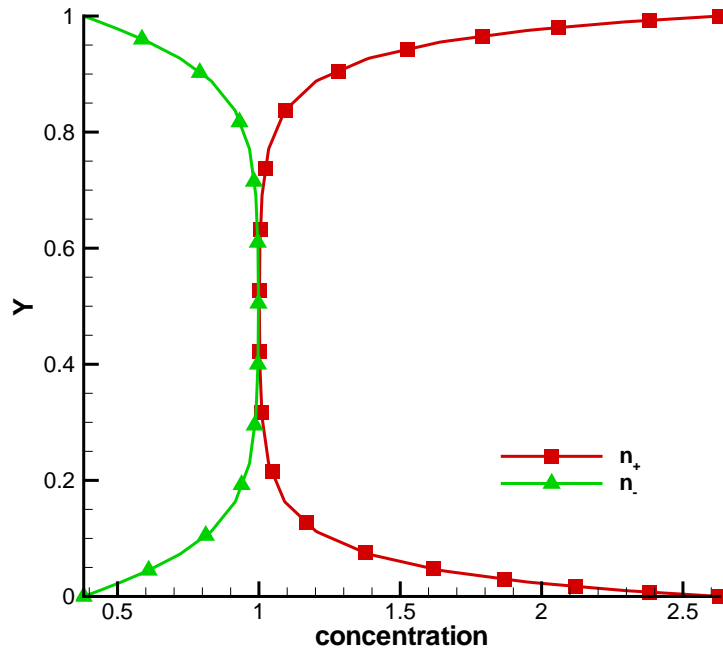


圖 8.15: 於  $x = 2$  處之正、負離子濃度之剖面圖。

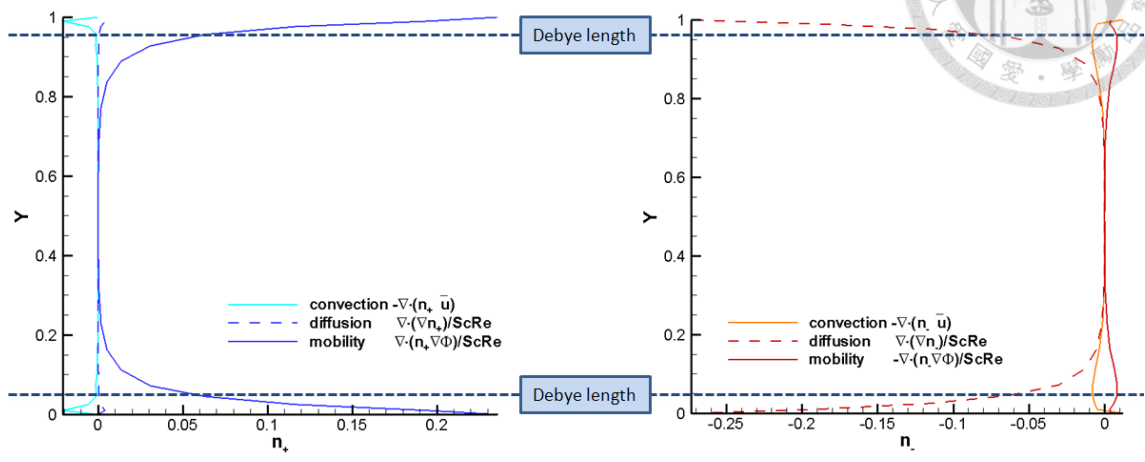
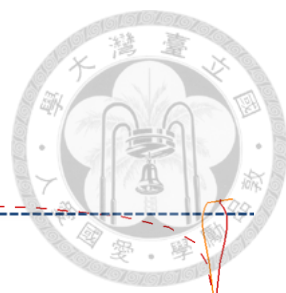


圖 8.16: 於  $x = 2$  處比較對流、擴散、遷移對離子濃度的影響。

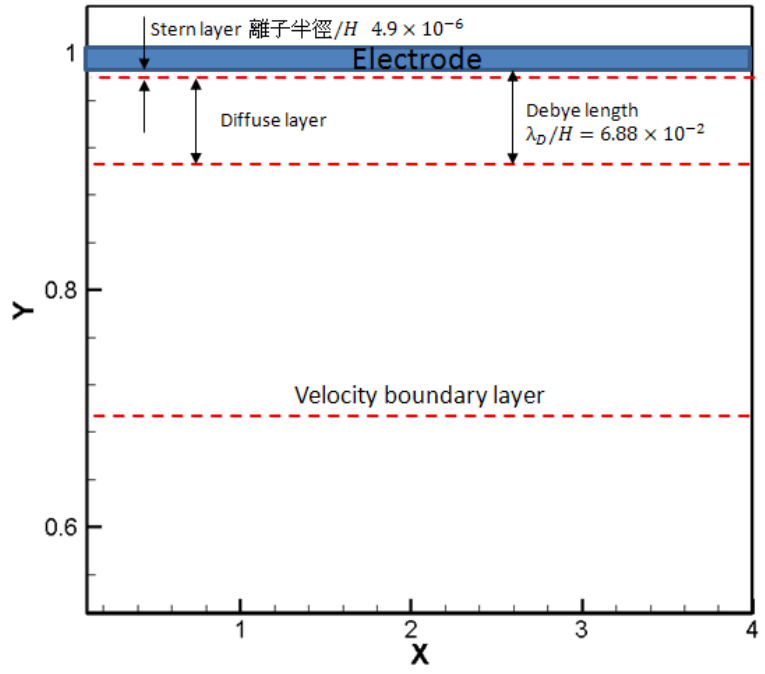
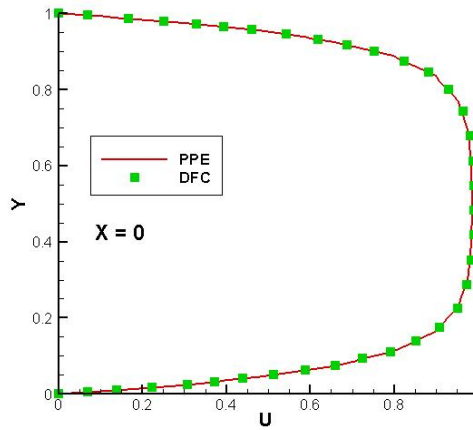
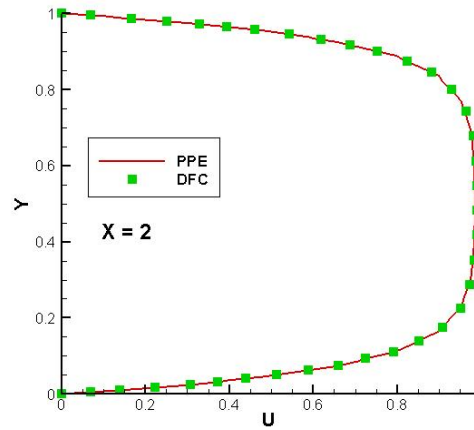


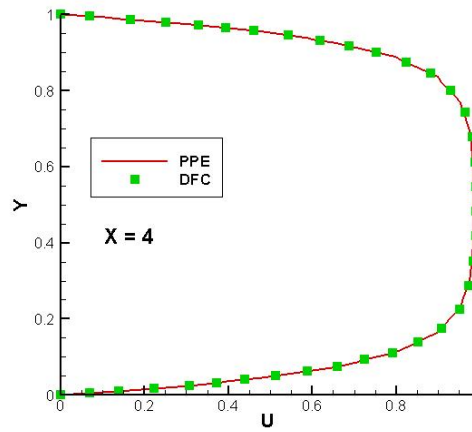
圖 8.17: 由數值模擬結果建構電雙層中的擴散層與固定層。



(a)



(b)



(c)

圖 8.18: 本論文所提出之PPE與文獻 [13]內DFC方法計算平行流道之結果於三個不同位置 (a)  $x = 0$ ; (b)  $x = 2$ ; (c)  $x = 4$  之速度 $u$ 的剖面圖。

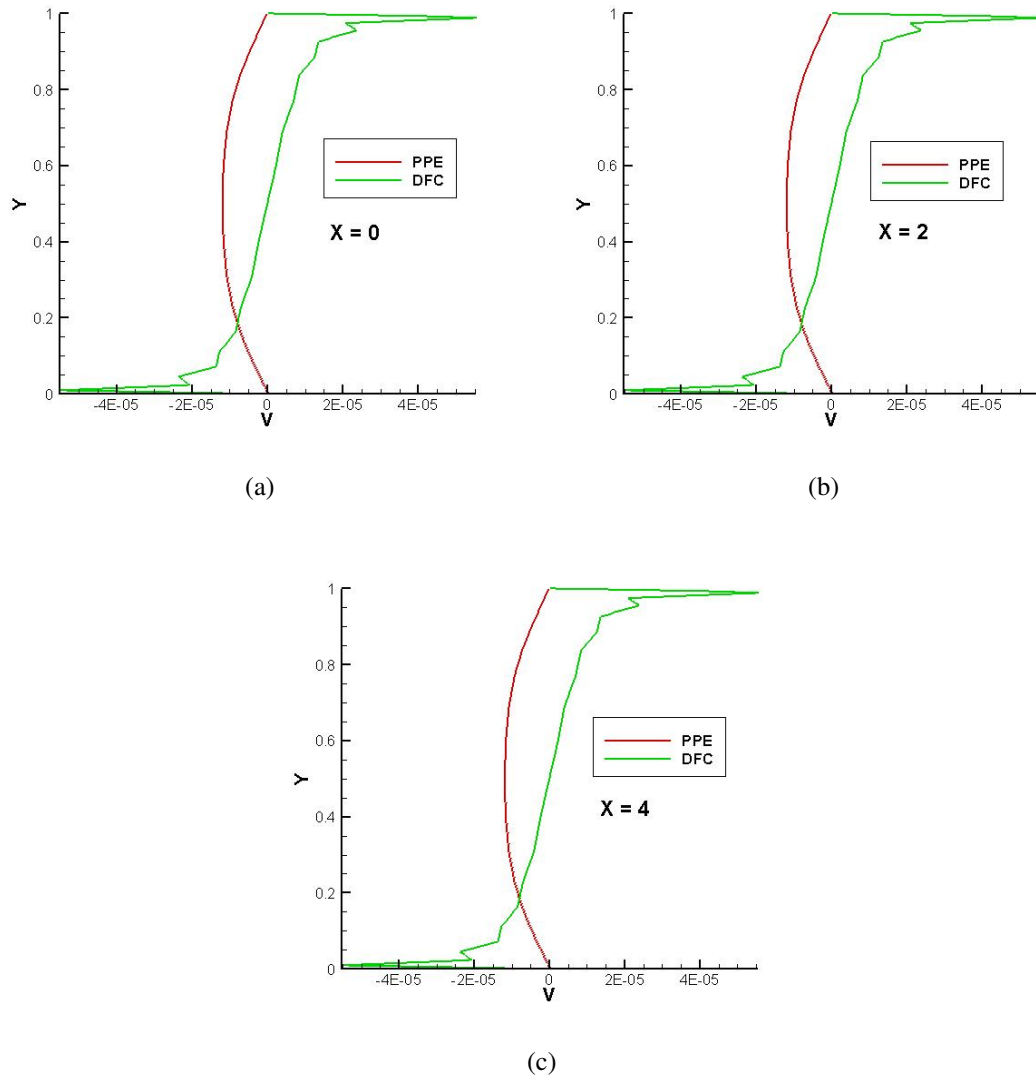
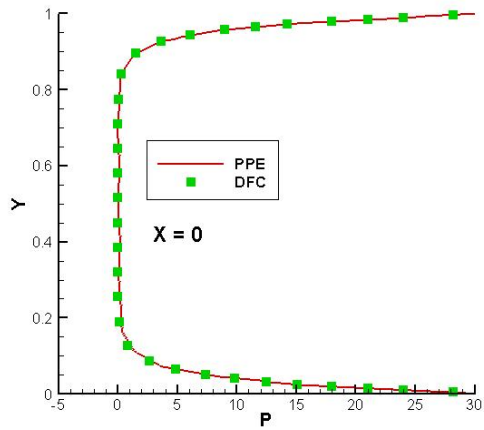
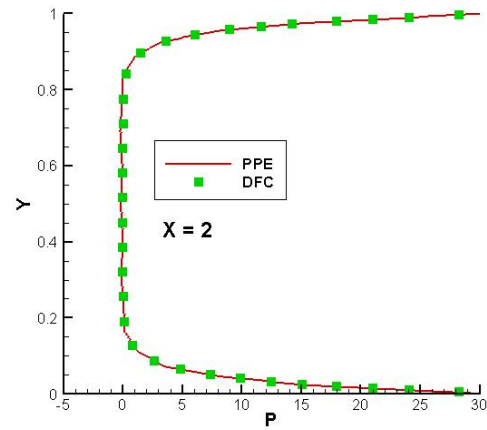


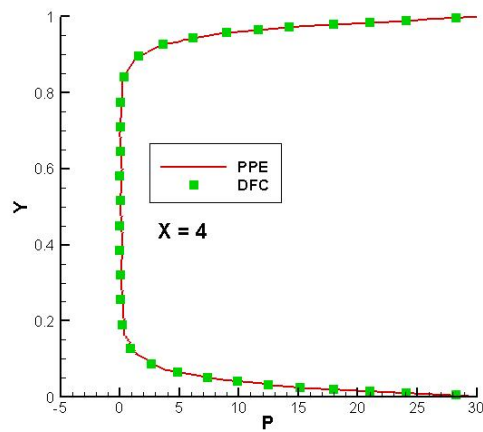
圖 8.19: 本論文所提出之PPE與文獻 [13]內DFC方法計算平行流道之結果於三個不同位置 (a)  $x = 0$ ; (b)  $x = 2$ ; (c)  $x = 4$  之速度 $v$ 的剖面圖。



(a)

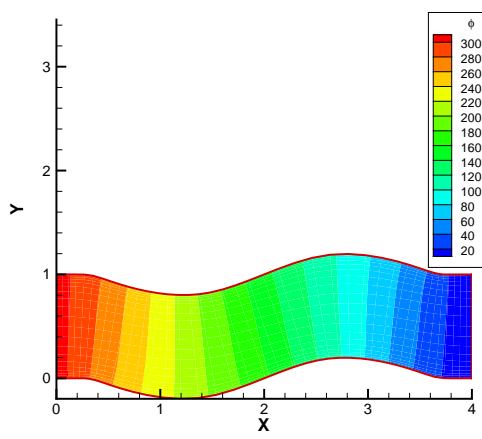


(b)

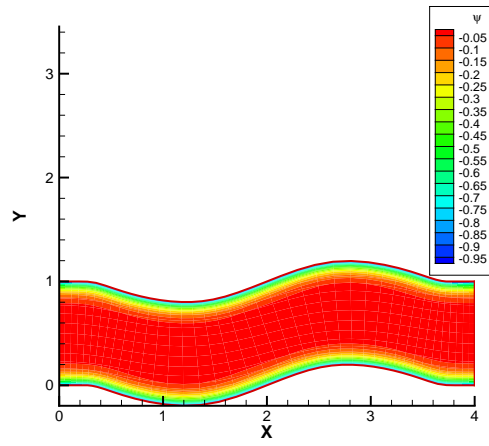


(c)

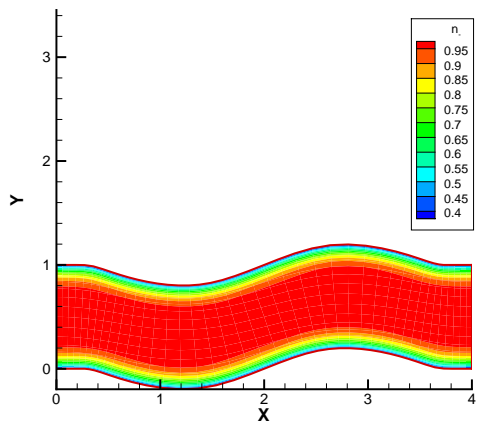
圖 8.20: 本論文所提出之PPE與文獻 [13]內DFC方法計算平行流道之結果於三個不同位置 (a)  $x = 0$ ; (b)  $x = 2$ ; (c)  $x = 4$  之壓力  $p$  的剖面圖。



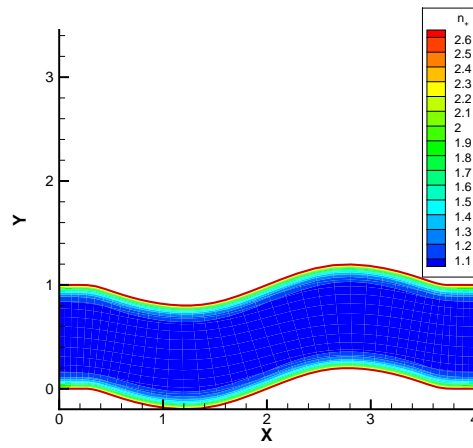
(a)



(b)

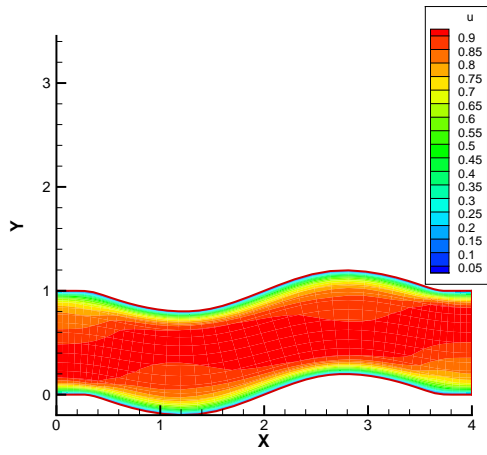


(c)

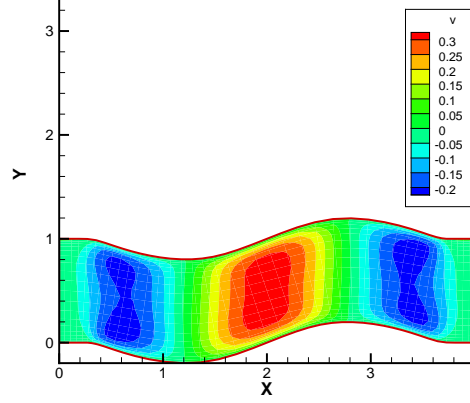


(d)

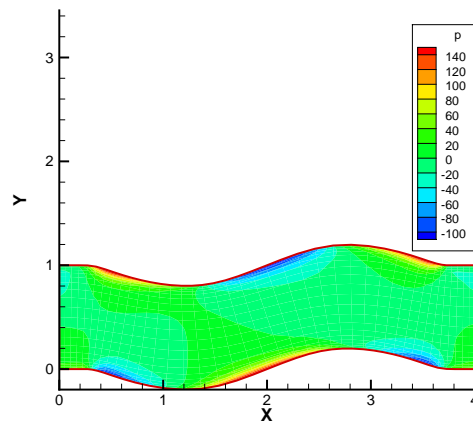
圖 8.21: 曲線流道內解的等高分佈圖。 (a)  $\phi$ ; (b)  $\psi$ ; (c)  $n_-$ ; (d)  $n_+$



(a)



(b)



(c)

圖 8.22: 曲線流道內解的等高分佈圖。 (a)  $u$ ; (b)  $v$ ; (c)  $p$

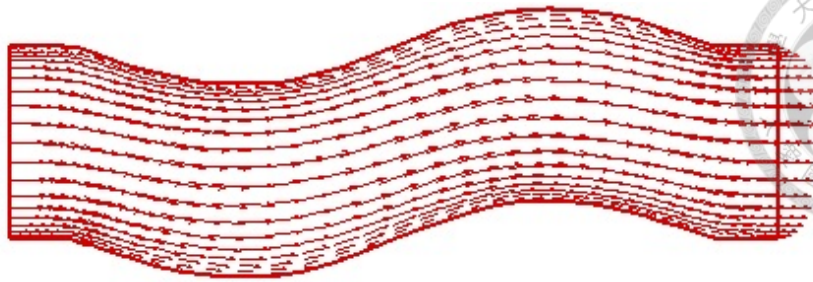
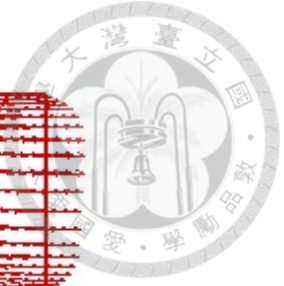


圖 8.23: 曲線流道內之速度向量圖。

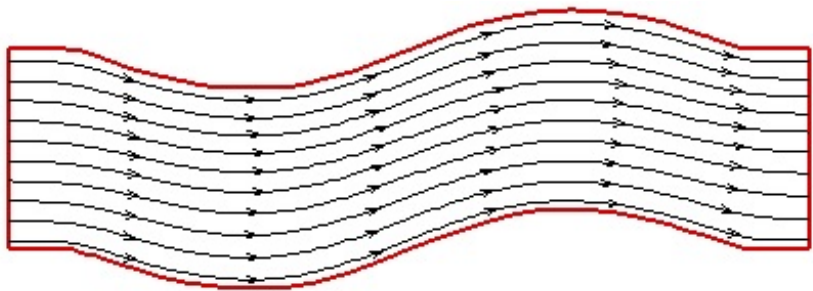


圖 8.24: 曲線流道內之流線圖。

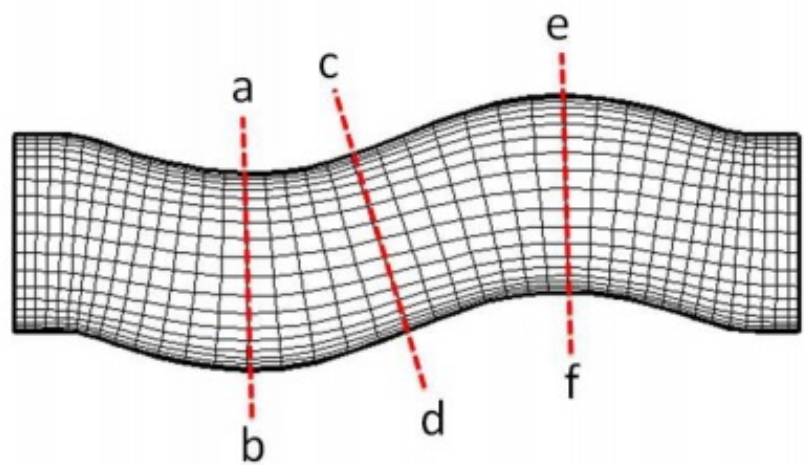
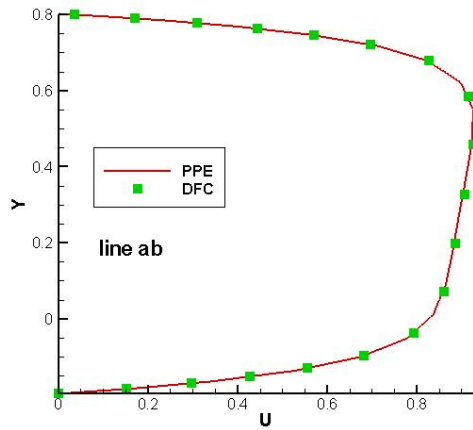
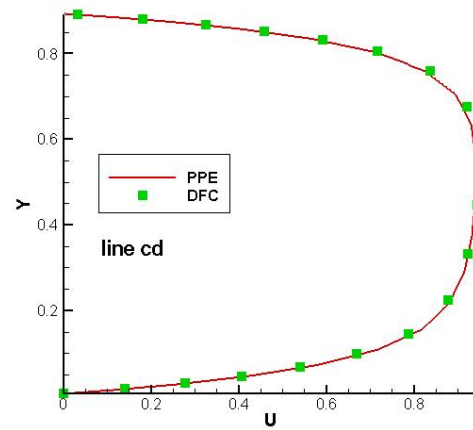


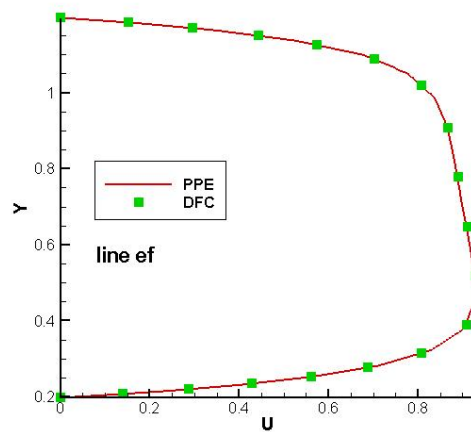
圖 8.25: 曲線流道於 (a) ab ( $x = 1.2$ ); (b) cd ( $x = 2$ ); (c) ef ( $x = 2.8$ ) 三個不同截面之示意圖。



(a)

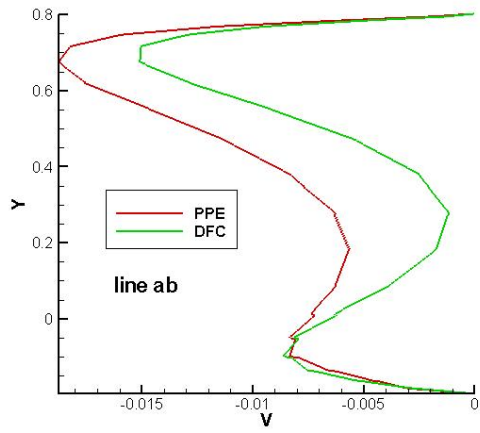


(b)

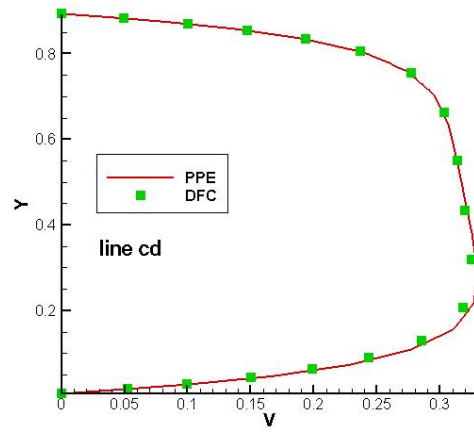


(c)

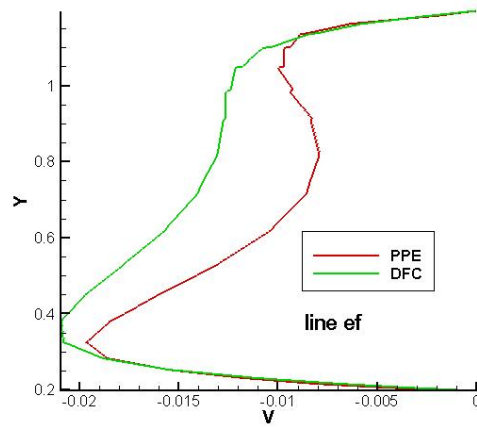
圖 8.26: 本論文所提出之PPE與文獻 [13]內DFC方法計算曲線流道之結果於三個不同位置 (a)  $ab$  ( $x = 1.2$ ); (b)  $cd$  ( $x = 2$ ); (c)  $ef$  ( $x = 2.8$ ) 比較速度 $u$ 的剖面圖。



(a)



(b)



(c)

圖 8.27: 本論文所提出之PPE與文獻 [13]內DFC方法計算曲線流道之結果於三個不同位置 (a)  $ab$  ( $x=1.2$ ); (b)  $cd$  ( $x=2$ ); (c)  $ef$  ( $x=2.8$ ) 比較速度 $v$ 的剖面圖。

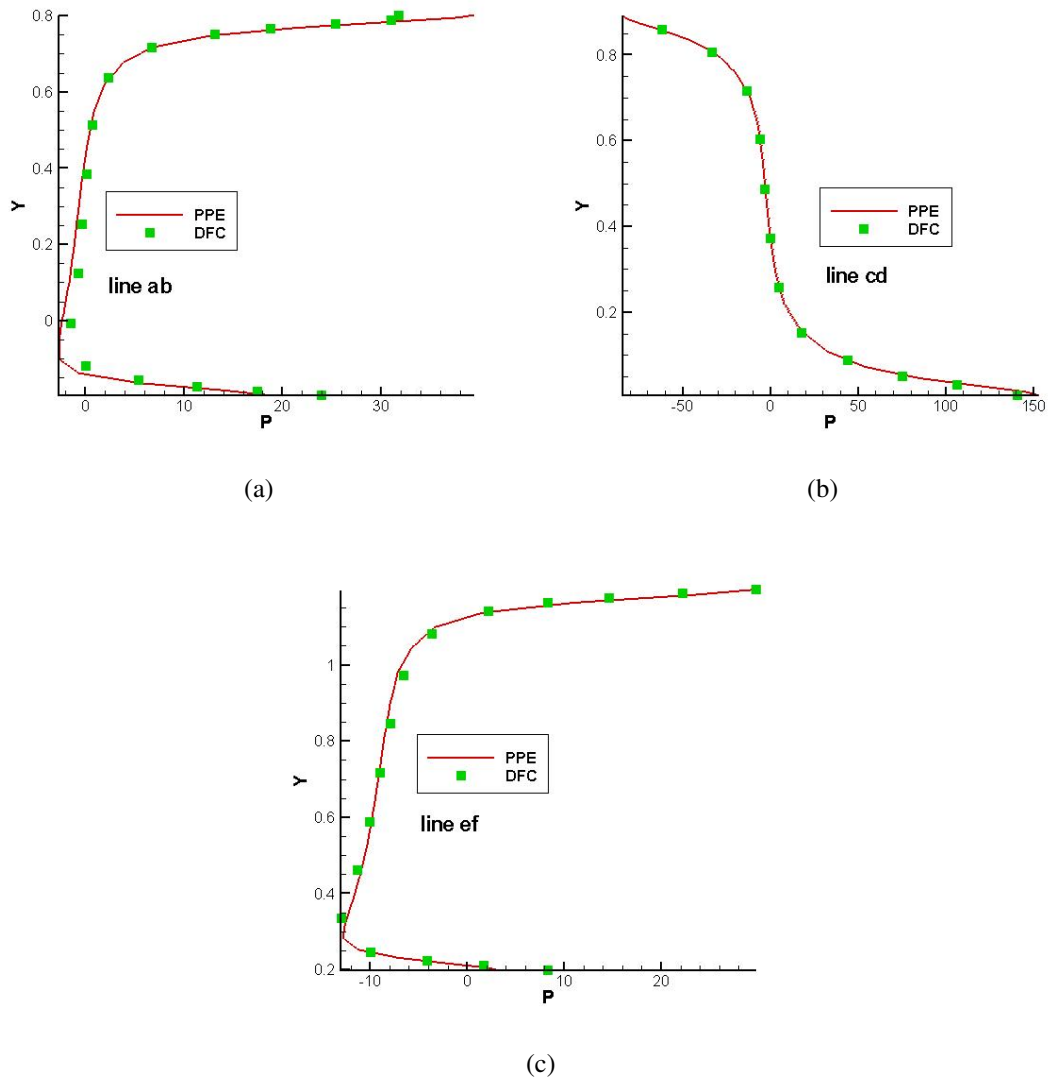


圖 8.28: 本論文所提出之PPE與文獻 [13]內DFC方法計算曲線流道之結果於三個不同位置 (a) ab ( $x = 1.2$ ); (b) cd ( $x = 2$ ); (c) ef ( $x = 2.8$ ) 比較壓力  $p$  的剖面圖。

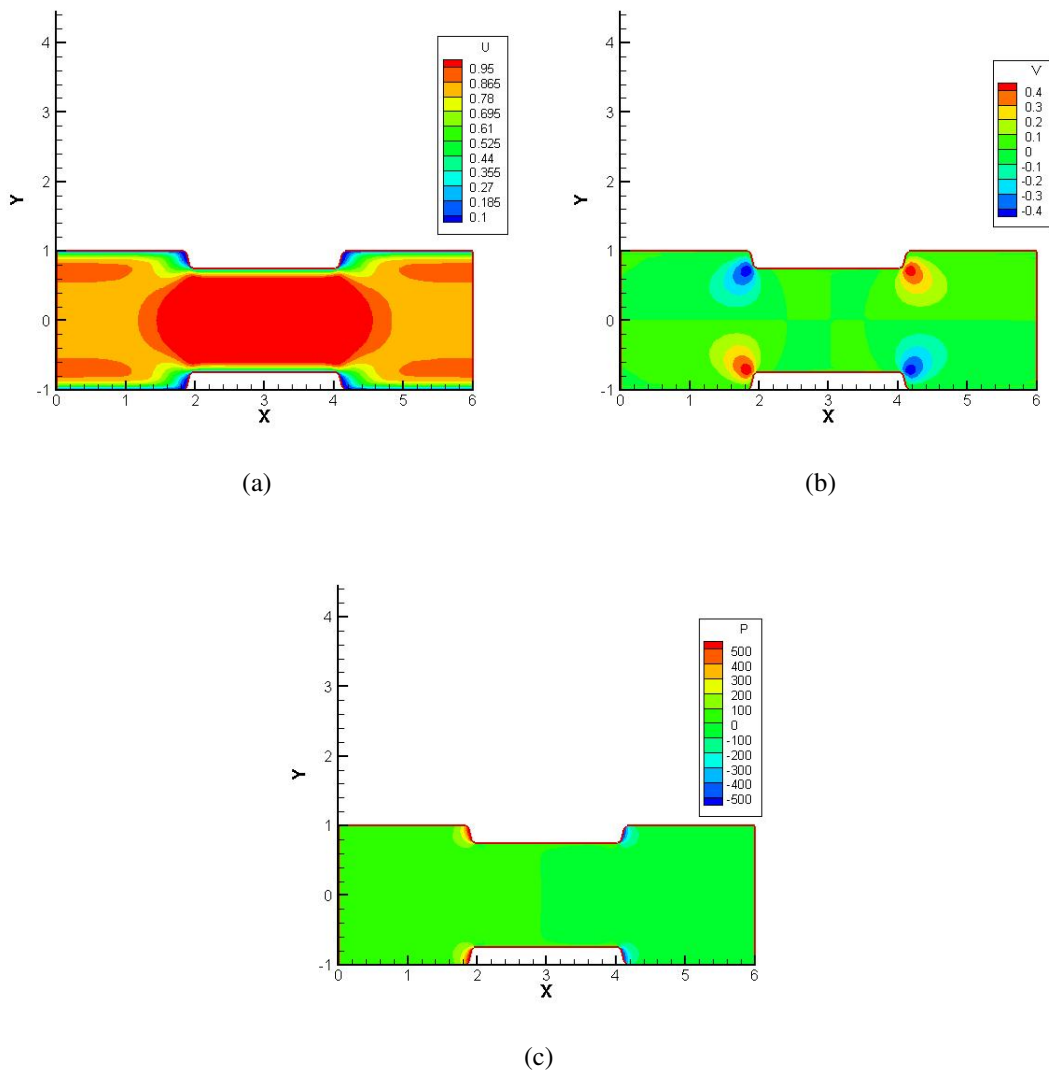


圖 8.29: 離子通道流問題一的等高分佈圖。 (a)  $u$ ; (b)  $v$ ; (c)  $p$

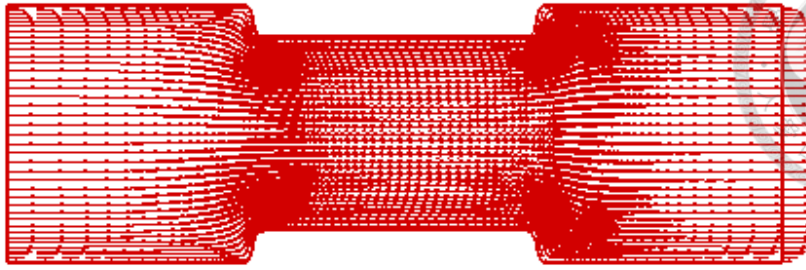
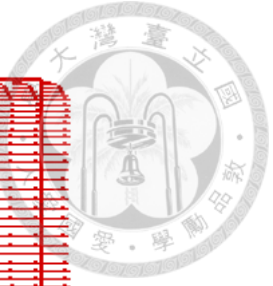


圖 8.30: 離子通道流問題一之速度向量圖。

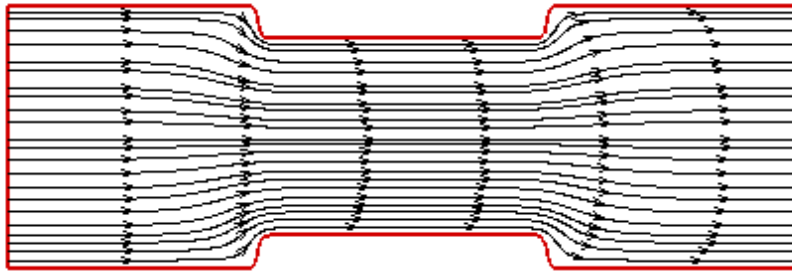


圖 8.31: 離子通道流問題一之流線圖。

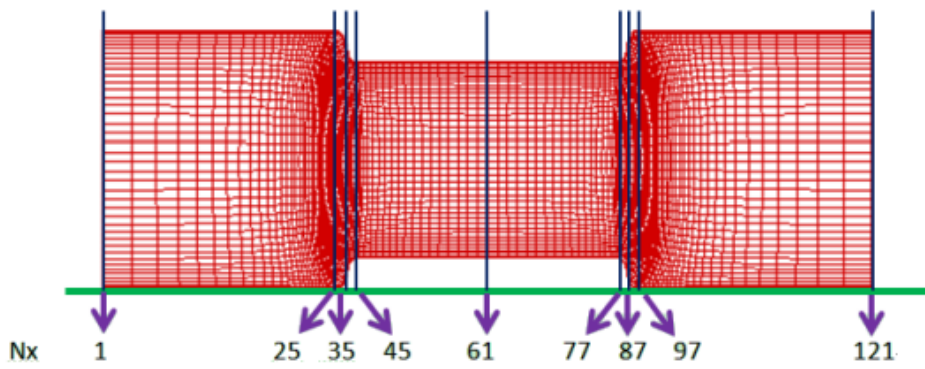
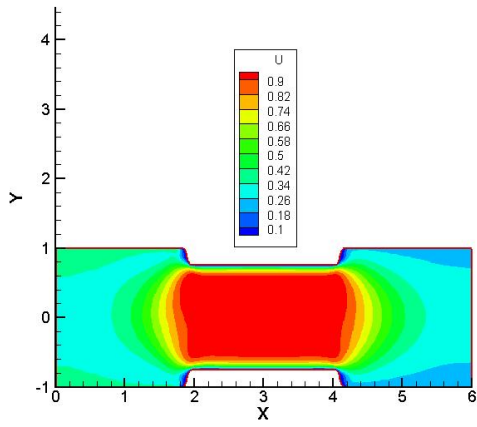
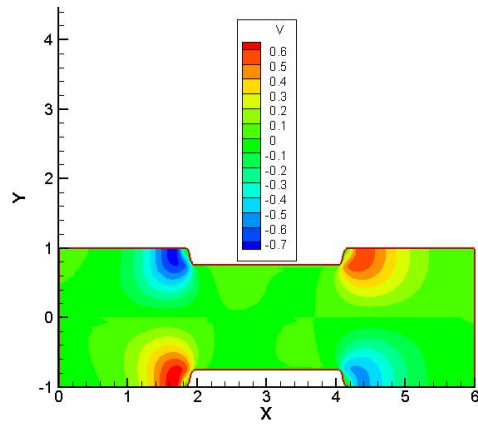


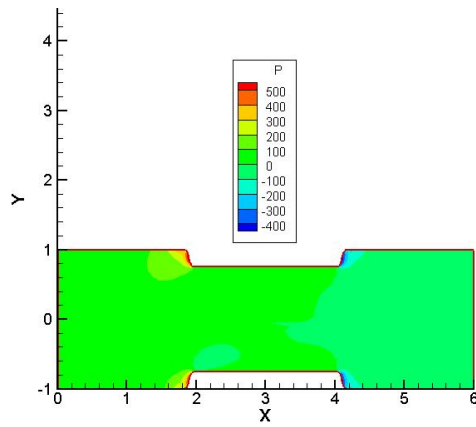
圖 8.32: 離子通道流問題一於九個不同截面之示意圖。



(a)



(b)



(c)

圖 8.33: 離子通道流問題二的等高分佈圖。(a)  $u$ ; (b)  $v$ ; (c)  $p$

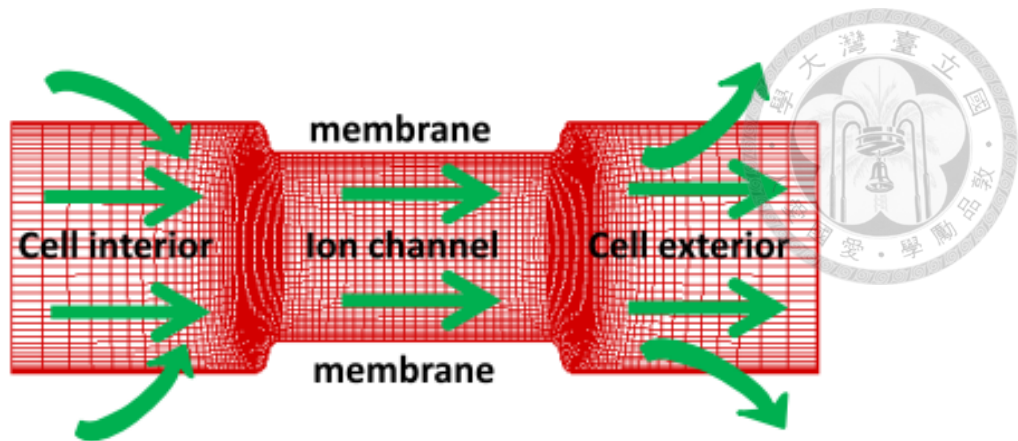


圖 8.34: 離子通道流問題二之預想流向示意圖。

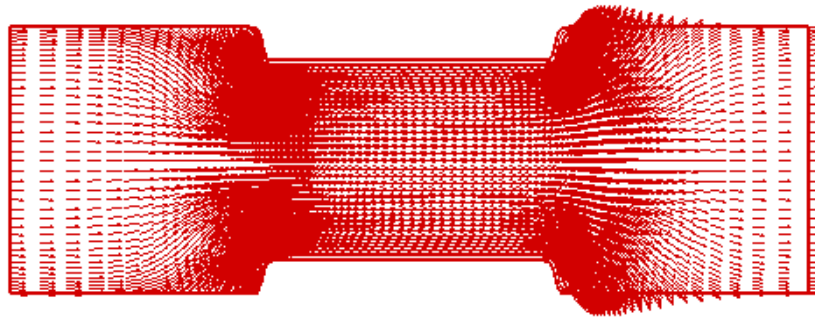


圖 8.35: 離子通道流問題二之速度向量圖。

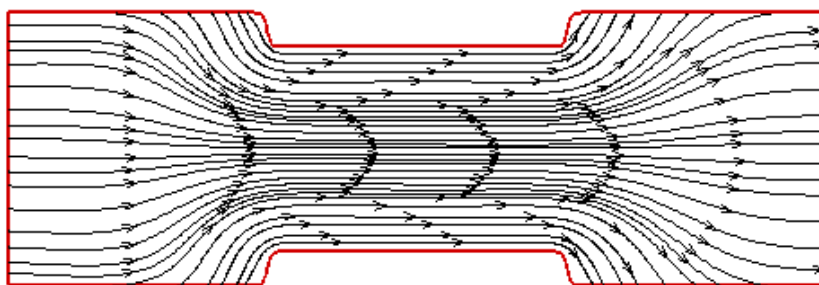


圖 8.36: 離子通道流問題二之流線圖。



## 第九章

### 結論

#### 9.1 研究成果與討論

本篇研究將Poisson-Nernst-Planck (PNP)方程組與Navier-Stokes (NS)方程組相互耦合以求解上、下壁面帶負極的仿離子通道模型。使用Combined Compact Difference (CCD)之空間離散方法，可捕捉流體速度在離子通道模型中靠近壁面的急遽變化，以及將Space Conservation Law (SCL)的條件引入Combined Compact Difference方法(SCL-CCD)，來得以求得卡式座標與曲線座標兩系統間轉換矩陣張量的項，進而在複雜的外型下做計算。

在模擬電滲流的過程中，觀察到電滲流的驅動力為庫倫力(Coulomb force)，其主要是受到正、負離子濃度差和壁面電位勢的影響，而正、負離子濃度的差值主要來自壁面-電位勢的大小，所以當慢慢往流道中心靠近時，正、負離子濃度的差異越小，此時庫倫力越小，故造成速度剖面呈平坦狀：藉由引入Poisson-Nernst-Planck方程組，可以描述正、負離子的運動行為；由於壁面帶負極，因此可以觀察到正離子濃度主要受到離子遷移力之影響，而負離子濃度則由離子的擴散項所主導。另外，在曲線流道內的模擬中，可以看到速度剖面隨著流道的外型而改變，流線亦是如此，這是因為當流道外型改變時，庫倫力施力於壁面的方向有所改變，進而影響到壁面的壓力，最後可直接影響速度的分佈。



## 9.2 未來工作與展望

在模擬離子通道流動問題時，爲了能計算不同複雜的外型，因此選用在曲線座標上執行計算，這之間牽涉到卡氏座標與曲線座標兩系統之間的微分關係項，本文使用高階的方法來計算這些項，以便確保準確性，並在網格轉換過程中，引入空間守恆條件的限制，成功地模擬了離子通道內的物理行爲。

對於未來可以繼續努力的方向，有以下之建議：

1. 雖然本文可以模擬在不同外形的通道，但在兩座標間關係轉換的項皆是用高階方法來做近似，因此很花費計算時間，又因爲動量方程有加入庫倫力的項，因此在推導PPE方程時，其源項會多出很多項次，故在解PPE方程時，也需要大量的計算時間，因此若能進行平行計算，將可更有效率的進行問題的模擬。

2. 除了模擬不同外形的仿離子通道，本文也模擬離子由細胞內部經由仿離子通道往細胞外部移動的情形，離子通道應是佈滿了整個細胞，而本文只截取了細胞的一部分來進行模擬，若能進行整個細胞離子通道的模擬，將可更了解細胞內物質的傳輸行爲。

3. 由於本篇論文僅在二維平面上進行計算，未來若能將此電滲流模型拓展到三維，並考慮更多的影響因素，如考慮溫度、磁力、重力...等的影響；都能使模型更貼近實際的情形，也可藉此對微流體系統有更進一步的了解。

# 附錄A



## 以逆變速度所表示之動量方程中各項整理之形式

在曲線座標上，以逆變(contravariant)速度分量 $U(u\xi_x + v\xi_y)$ 和 $V(u\eta_x + v\eta_y)$ 所表示之動量方程式為

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho J\phi) + \frac{\partial}{\partial \xi}(\rho JU\phi) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\rho JV\phi) = -p^\phi + \frac{\partial}{\partial \xi}(\Gamma^\phi Jg^{11} \frac{\partial \phi}{\partial \xi}) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\Gamma^\phi Jg^{22} \frac{\partial \phi}{\partial \eta}) + S_1^\phi + S_2^\phi + S_3^\phi \quad (1)$$

各項整理如表1所示。

	$\phi$	$\Gamma^\phi$	$p^\phi$	$S_2^\phi$	$S_3^\phi$
$\xi$ -momentum	$U$	$\mu$	$J(p_\xi g^{11} + p_\eta g^{12})$	$\frac{\partial}{\partial \xi}(\mu Jg^{12} \frac{\partial U}{\partial \eta}) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\mu Jg^{21} \frac{\partial U}{\partial \xi})$	$S_{31}^U - S_{32}^U - S_{33}^U$
$\eta$ -momentum	$V$	$\mu$	$J(p_\xi g^{12} + p_\eta g^{22})$	$\frac{\partial}{\partial \xi}(\mu Jg^{12} \frac{\partial V}{\partial \eta}) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\mu Jg^{21} \frac{\partial V}{\partial \xi})$	$S_{31}^V - S_{32}^V - S_{33}^V$

表 1: 方程式(1)中各項整理之形式

其中

$$S_1^U = J(\xi_x S_1 + \xi_y S_2),$$

$$S_1^V = J(\eta_x S_1 + \eta_y S_2),$$

$$S_1 = Gx(n_- - n_+) (\xi_x \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \xi_x \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial \phi}{\partial \eta})$$

$$S_2 = Gx(n_- - n_+) (\xi_y \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \xi_y \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial \phi}{\partial \eta})$$

$$S_{31}^{Uk} = (\rho JUu)(\epsilon_x^k)_\xi + (\rho JUv)(\epsilon_y^k)_\xi + (\rho JVu)(\epsilon_x^k)_\eta + (\rho JVv)(\epsilon_y^k)_\eta,$$

$$S_{32}^{Uk} = [\mu J(g^{11} \frac{\partial u}{\partial \xi} + g^{12} \frac{\partial u}{\partial \eta})](\epsilon_x^k)_\xi + [\mu J(g^{11} \frac{\partial v}{\partial \xi} + g^{12} \frac{\partial v}{\partial \eta})](\epsilon_y^k)_\xi \\ + [\mu J(g^{21} \frac{\partial u}{\partial \xi} + g^{22} \frac{\partial u}{\partial \eta})](\epsilon_x^k)_\eta + [\mu J(g^{21} \frac{\partial v}{\partial \xi} + g^{22} \frac{\partial v}{\partial \eta})](\epsilon_y^k)_\eta,$$

$$S_{33}^{Uk} = \frac{\partial}{\partial \xi} \{ [\mu Ju][g^{11}(\epsilon_x^k)_\xi + g^{12}(\epsilon_x^k)_\eta] + [\mu Jv][g^{11}(\epsilon_y^k)_\xi + g^{12}(\epsilon_y^k)_\eta] \} \\ + \frac{\partial}{\partial \eta} \{ [\mu Ju][g^{21}(\epsilon_x^k)_\xi + g^{22}(\epsilon_x^k)_\eta] + [\mu Jv][g^{21}(\epsilon_y^k)_\xi + g^{22}(\epsilon_y^k)_\eta] \},$$

$$\begin{aligned}
g^{11} &= \frac{\alpha}{j^2}, & g^{12} = g^{21} &= -\frac{\beta}{j^2}, & g^{22} &= \frac{\gamma}{j^2}, \\
\alpha &= x_\eta^2 + x_\eta^2, & \beta &= x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta, & \gamma &= x_\xi^2 + y_\xi^2, \\
J &= x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi, & \varepsilon^1 &= \xi, & \varepsilon^2 &= \eta.
\end{aligned}$$

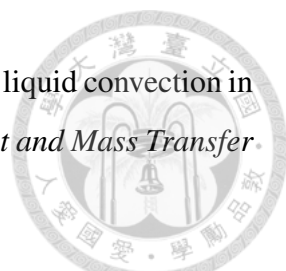







## 參考文獻

- [1] Prashanta Dutta and Ali Beskok, Analytical solution of combined electroosmotic/pressure driven flows in two-dimensional straight channels: Finite Debye layer effects, *Anal. Chem.*, Vol 73, pp. 1979-1986, 2001
- [2] Zhang Yao, Wu Jiankang. and Chen Bo, A coordinate transformation method for numerical solutions of the electric double layer and electroosmotic flows in a microchannel *Int. J. for Numerical Methods in Fluids* , Vol 68, pp. 671-685, 2012
- [3] David C. Grahame, The Electrical Double layer and the Theory of Electrocapillary, *Chem. Rev.*, Vol. 44, pp. 441-501, 1947
- [4] Neelesh A. Patankar and Howard H. Hu, Numerical Simulation of Electroosmotic Flow, *Anal. Chem.*, Vol. 70, pp. 1870-1881, 1998
- [5] Shizhi Qian and Haim H. Bau, Theoretical investigation of electro-osmotic flows and chaotic stirring in rectangular cavities, *Applied Mathematical Modeling*, Vol. 29, pp. 726-753, 2005
- [6] R.-J. Yang, L.-M. Fu, and C.-C. Hwang, Electroosmotic Entry Flow in a Microchannel, *Journal of Colloid and Interface Science* , Vol 244, pp. 173-179, 2001
- [7] W.B. Russel, D.A. Saville, and W.R. Schowalter, Colloidal dispersions, Cambridge monographs on mechanics and applied mathematics Cambridge University Press, Cambridge, 1989.
- [8] S. V. Patankar, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere, New York, 1980.

- 
- [9] Chun Yang, Dongqing Li, , Jacob H. Masliyah, Modeling forced liquid convection in rectangular microchannels with electrokinetic effects, *Int. J. Heat and Mass Transfer*, Vol. 41, pp. 4229-4249, 1998
- [10] Jahrul Alam, John C. Bowman, Energy-Conserving Simulation of Incompressible Electro-Osmotic and Pressure-Driven Flow, *Theoretical and computational Fluid Dynamics*, pp. 1-17, 2002.
- [11] U. Ghia, K. N. Ghia, High Re Solutions for incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equation and a Multigrid Method, *J. Comp. Physics*, Vol. 48, pp. 387-411, 1982
- [12] Ercan Erturk, Numerical solutions of 2-D steady incompressible flow over a backward-facing step, Part I: High Reynolds number solutions, *Computers and Fluids*, Vol. 37, pp. 633-655, 2008
- [13] Tony W. H. Sheu and P. H. Chiu, A divergence-free-condition compensated method for incompressible Navier-Stokes equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 196, pp. 4479-4494, 2007.
- [14] Tony W. H. Sheu and R. K. Lin, An incompressible Navier-Stokes model implemented on non-staggered grids, *Numer. Heat Transf., B Fundam.*, Vol. 44(3), pp. 277-294, 2003.
- [15] 林瑞國, 不可壓縮黏性熱磁流之科學計算方法, 國立台灣大學博士論文, 2005.
- [16] Christopher K. W. Tam, Jay C. Webb, Dispersion-ralation-preserving finite difference schemes for computational acoustics, *Journal of Computational Physics.*, Vol. 194, pp. 194-214, 1993.
- [17] Richard D. Handy, A Frank von der Kammer, A Jamie R. Lead A, Martin Hassellöv, A Richard Owen, A Mark Crane, The ecotoxicology and chemistry of manufactured nanoparticles, *Ecotoxicology*, Vol. 17, pp. 287-314, 2008.
- [18] David E Clapham, Symmetry, Selectivity, and the 2003 Nobel Prize, *Cell*, Vol. 115, pp. 641-646, 2003.

- 
- [19] 袁聖宗, 在曲線座標下求解非線性EHD方程, 國立台灣大學碩士論文, 2013.
- [20] 王聖鋒, 發展求解NS與PNP耦合方程之方法, 國立台灣大學碩士論文, 2013.
- [21] P. H. Chiu, Tony W. H. Sheu, On the development of a dispersion-relation-preserving dual-compact upwind scheme for convection-diffusion equation, *Journal of Computational Physics.*, Vol. 228, pp. 3640-3655, 2009.
- [22] Peter C. Chu, Chenwu Fan, A three-point combined compact difference scheme, *J. Comput. Phys.*, Vol. 140, pp. 370-399, 1998.
- [23] Akil J. Harfash, Huda A. Jalob Sixth and Fourth Order Compact Finite Difference Scheme for Two and Three Dimension Poisson Equation with Two Methods to derive These Schemes, *Basrah Journal of Science (A)*, Vol.24(2),1-20, 2006.
- [24] Hans Johnston, Cheng Wang, Jian-Guo Liu A Local Pressure Boundary Condition Spectral Collocation Scheme for the Three-Dimensional Navier-Stokes Equations, *J. Sci. Comput.*, Vol. 60, pp. 612-626, 2014.