

國立臺灣大學工學院應用力學研究所

碩士論文

Institute of Applied Mechanics

College of Engineering

National Taiwan University

Master's Thesis

黏彈流體於靜態混合器中混合的數值研究

Numerical study of mixing of viscoelastic fluids in static
mixers

廖禹曉

Yu-Liang Liao

指導教授：李雨 博士

Advisor: U Lei, Ph.D.

中華民國 113 年 7 月

July, 2024



序言



能夠順利完成這篇論文，首先要感謝的是我的指導教授李雨博士。透過定時與老師回報研究進度，能夠知道自己所遺漏的重點，並在走錯研究方向時，得到老師的指正和引導。不僅幫助我解決研究中的困難，還在研究方法上給予我寶貴的建議，李雨老師的諄諄教誨，使我在學術道路上受益匪淺。另外也感謝口試委員雷顯宇教授和田華忠教授的建議，使此篇論文能夠更加完整。

感謝阿珠（我媽），在我追求碩士學歷時，給予我精神上還有物質上的幫助。每晚回家總有熱騰騰的飯菜等著我，不用擔心會餓肚子。此外，每天還會跟我分享八點檔的故事有多荒唐，為我繁忙的學習生活增添不少樂趣。接著要感謝我姊，在我求學階段也給予幫助，不論是請我吃大餐還是買東西送我，甚至還借我信用卡（雖然有時候刷不過）。誠摯地向我的家人說聲謝謝。

再來是這一路上幫助與陪伴我的人們，感謝學長英傑哥在我修課和進行研究感到煩惱時，慷慨給予指導和教導；感謝實驗室同儕柏宇，遇到困難能互相勉勵，一起思考如何解決，為碩士的研究奮鬥；感謝研究所同學聖偉、煒程、品竹、422柏宇，陪我修課、讀書、吃飯、打牌，讓我碩士生涯不孤單；感謝大學同學家宇、尹棠、呂齊，跟我出國吃香喝辣、增廣見聞，度過難忘的一周；還要感謝我的女朋友，不離不棄地陪在我身邊，每天打電話來關心我，還會怕我太無聊故意打來影響我寫論文，有你的支持與陪伴，讓我得到身心的放鬆。

最後要感謝自己，在這兩年來完成許多事情。例如，兼職家教負擔自己的基本開銷，不再依賴家裡的生活費；準備英文的檢定考試，多益成績獲得滿意的分數；有幸錄取外商公司的暑期實習，深入了解半導體產業；在學期間修習半導體學程，增加自己的專業知識。在未來這些事都不足以掛齒，但要記得自己在這期間的努力不懈與成長。

中文摘要

本研究透過 COMSOL Multiphysics 計算軟體進行數值模擬。在層流條件下，利用稀薄質傳法(Transport of Diluted Species)，計算黏彈流體於靜態混合器中流場和濃度場，並進而分析其混合效果及壓降。本文所選用之混合器元件共有兩種，分別為 SMX 元件及突縮圓管(Sudden Contraction Tube，簡稱 SCT)元件。通過調整元件種類、排列、及元件中的幾何參數，並選用不同黏度之流體，和不同流體模型(以反應不同程度之彈性效應)進行計算，以探討其對混合效果的影響。

經本文的研究，可得以下結論：(1)經與實驗比較，採用黏彈模型(如 Giesekus Model)較採用剪切稀化模型(如 Carreau Model)所得的計算結果更能與實驗結果相符，後者約低估了 18% 的混合效果；但前者卻需多耗約 5 倍計算時間、且兩種模型的計算結果定性相符，故建議如作靜態混合器參數的最佳化研究，可採用剪切稀化模型。(2)如使用標準 SMX 靜態混合器對黏彈流體或較黏牛頓流體進行混合，其最佳化幾何設計參數可採用文獻上提出的設計公式， $N_p = \frac{2}{3}N_x - 1$ 和 $N_\theta = 90$ ，其中 N_x 為跨越流道寬度的橫桿數目， N_p 為沿著流道的平行橫桿數目， N_θ 為相鄰兩橫桿之間的角度。唯由該公式可得多於一組的設計參數，宜選擇較少桿件那組以降低混合器壓降，最終得出 $N_x = 6$ 、 $N_p = 3$ 、 $N_\theta = 90$ ；對於黏度較低(如水)之流體，使用商業標準之 SMX 混合器，即可達到最有效的混合。(3)相較於 SMX 靜態混合器，SMX+SCT 混合器在能量耗損方面明顯增加，需根據具體應用來選擇合適的混合器。(4)隨著魏森貝格數(Weissenberg Number)的增加，流體的彈性效應增強，能量耗損也隨之減少，流體的混合效果獲得改善。

本研究為設計高效能的靜態混合器提供理論基礎，對提升工業製程中的混合效率具有重要意義，不僅可應用於化工、製藥、食品加工等傳統工業，還有助推動新興領域如生物工程和材料科學中的應用。

關鍵詞：黏彈流體、靜態混合器、層流混合、混合指標、壓力降

ABSTRACT



Numerical simulations were performed for studying the flow field and concentration field of viscoelastic fluids in static mixers, and thus the mixing performance and pressure drop were analyzed, using Transport of Diluted Species Method, with the aid of COMSOL Multiphysics, under laminar conditions. Two mixing elements were employed, the SMX element and the Sudden Contraction Tube (SCT) element. The mixing performance was analyzed for varied mixers with different combinations of mixing elements (different types and arrangements), using different fluids with different viscosities, and different constitutive models accounting for various elastic effects.

Several findings are as follows. (1) The calculations using the viscoelastic model (such as the Giesekus Model, which accounts more appropriate the elastic effect) are more consistent with the experimental results than those using the shear thinning model (such as the Carreau Model), and the latter underestimates the mixing effect by about 18%. However, the calculation time using the Giesekus Model is about 5 times longer than that using the Carreau Model, and both calculations are qualitatively similar. Therefore, it is recommended to use the shear thinning model for optimization research on static mixer parameters. (2) For the widely-used SMX static mixer in industry, the universal design rule, $N_p = \frac{2}{3}N_x - 1$ and $N_\theta = 90$, proposed in the literature, can be applied for the mixing of viscoelastic fluids and viscous Newtonian fluids, according to the present calculation. Here N_x represents the number of cross-bars over the width of mixer, N_p represents the number of parallel cross-bars per element, and N_θ represents the angle between opposite cross-bars. However, the design rule can yield multiple sets of design parameters, and the set with fewer bars should be chosen for smaller pressure drop across the mixer. The final parameters for mixing optimization is $N_x = 6$ 、 $N_p = 3$ 、 $N_\theta = 90$. For fluids with lower viscosity (such as water), using the commercial standard SMX

mixer can achieve the most efficient mixing. (3) Compared to the SMX static mixer, the SMX+SCT mixer has significantly higher energy consumption, so the appropriate mixer should be selected based on the specific application. (4) As the Weissenberg number increases, the elastic effects of the fluid are enhanced, resulting in reduced energy consumption and improved mixing performance.

This study provides a theoretical basis for designing high-efficiency static mixers, which is of great significance for improving the mixing efficiency in industrial processes. It can be applied not only in traditional industries such as chemical engineering, pharmaceuticals, and food processing, but also in emerging fields such as bioengineering and materials science.

Keywords: Viscoelastic fluids, Static mixers, Laminar mixing, Mixing index, Pressure drop.

目次



序言	i
中文摘要	ii
ABSTRACT	iii
目次	v
圖次	vii
表次	xi
符號說明	xii
1 第一章 緒論	1
1.1 簡介-黏彈流體	1
1.2 簡介-靜態混合器	2
1.3 文獻回顧	4
1.4 研究動機	8
2 第二章 理論模型	10
2.1 物理模型與基本假設	10
2.1.1 SMX 靜態混合器	10
2.1.2 SMX+SCT 混合器	13
2.1.3 基本假設	15
2.2 流體性質	15
2.2.1 流體模型	15
2.3 統御方程式	18
2.3.1 內部流場	18
2.3.2 稀薄質傳法	21

2.3.3	混合指標	22
2.4	初始條件與邊界條件	22
2.5	COMSOL Multiphysics 計算軟體.....	24
3	第三章 結果與討論	26
3.1	網格設定	27
3.2	SMX 幾何結構對於混合之影響	30
3.2.1	不同 Nx 之參數設計	32
3.2.2	不同 Np 之參數設計	33
3.2.3	不同 $N\theta$ 之參數設計	35
3.2.4	最佳化設計與實驗結果比較	37
3.3	不同流體對於 SMX 混合器之影響	39
3.4	SMX+SCT 混合器之混合情形	42
3.4.1	不同突縮比之影響	43
3.4.2	不同 SCT 長度之影響	47
3.5	黏彈流體模型與實驗結果比較	50
3.5.1	定性分析	50
3.5.2	定量分析	52
3.5.3	法向應力差	55
3.6	不同魏森貝格數之混合情形	59
4	第四章 結論與未來展望	63
	參考文獻	64

圖次



圖 1.1	市面上的各種靜態混合器。本圖錄自 Ghanem et al.[10]。	3
圖 1.2	標準 SMX 靜態混合器的幾何結構。本圖錄自 Liu et al.[15]。	4
圖 1.3	矽玻璃微型流道。本圖錄自 Gan et al.[17]。	5
圖 1.4	SMX 靜態混合器之幾何結構參數：(a) $Nx = 4$ 、 $Np = 3$ 、 $N\theta = 90^\circ$ (b) $Nx = 7$ 、 $Np = 3$ 、 $N\theta = 90^\circ$ (c) $Nx = 4$ 、 $Np = 5$ 、 $N\theta = 90^\circ$ (d) $Nx =$ 4 、 $Np = 3$ 、 $N\theta = 120^\circ$ 。本圖錄自 Singh et al [18]。	6
圖 1.5	T 形結構混合器。本圖錄自 Zhang et al.[21]。	7
圖 2.1	標準 SMX 四元件靜態混合器，其 $Nx = 8$, $Np = 3$, $\theta = 90^\circ$ 。本圖錄自 Singh et al.[18]。	11
圖 2.2	SMX 靜態混合器：(a) 三維立體透視圖。(b) 二維側面透視圖。圖為本研 究所建構於 COMSOL 計算軟體之模型。	12
圖 2.3	SMX+SCT 混合器：(a)三維立體透視圖。(b)二維側面透視圖。圖為本研 究所建構於 COMSOL 軟體之模型。本例 $DSCT/D = 1/2$ ， $AC/A0 = 1/4$ 。	14
圖 2.4	軟體邊界條件之設定。(a)流道入口處，左半圓面設定 $c = C0$ ，右半圓面 設定 $c = 0$ 。(b)混合器於穩態時，利用稀薄質傳法所計算之濃度分布。	24
圖 2.5	COMSOL Multiphysics 進行數值計算之步驟流程。	25
圖 3.1	SMX 靜態混合器於 COMSOL 所使用之網格尺寸示意圖。採用「使用者 控制的網格」，共 1,239,374 個有限元素。	27
圖 3.2	SMX+SCT 混合器於 COMSOL 所使用之網格尺寸示意圖。採用「使用者 控制的網格」，共 884,772 個有限元素。	28
圖 3.3	SMX 靜態混合器於 COMSOL 所使用之網格尺寸示意圖。採用「細化 (Fine)網格」，共 23,927,146 個有限元素。	29
圖 3.4	SMX 靜態混合器於 COMSOL 所使用之網格尺寸示意圖。採用「正常	

(Normal)網格」，共 8,034,806 個有限元素。	29
圖 3.5 3 種不同內建網格之混合指標(在各個混合器元件出口截面處)的影響。 .	30
圖 3.6 SMX 靜態混合器之截面示意圖，紅色部份顯示 6 個檢視截面。截面所在 位置分別為： $2L$, $3L$, $4L$, $5L$, $6L$ 和 $7L$ ，其中 L 為單一混合元件的長度。	31
圖 3.7 Nx 對固定 $Np = 3$ 和 $N\theta = 90^\circ$ 的混合器之濃度分布(在各個混合器元件 出口截面處)的影響。	32
圖 3.8 Nx 對固定 $Np = 3$ 和 $N\theta = 90^\circ$ 的混合器之混合指標(在各個混合器元件 出口截面處)的影響。	33
圖 3.9 Np 對固定 $Nx = 8$ 和 $N\theta = 90^\circ$ 的混合器之濃度分布(在各個混合器元件 出口截面處)的影響。	34
圖 3.10 Np 對固定 $Nx = 8$ 和 $N\theta = 90^\circ$ 的混合器之混合指標(在各個混合器元件 出口截面處)的影響。	35
圖 3.11 $N\theta$ 對固定 $Nx = 8$ 和 $Np = 3$ 的混合器之濃度分布(在各個混合器元件出 口截面處)的影響。	36
圖 3.12 $N\theta$ 對固定 $Nx = 8$ 和 $Np = 3$ 的混合器之混合指標(在各個混合器元件出 口截面處)的影響。	36
圖 3.13 使用從(3-1)與(3-2)式推導出的最佳化參數，將實驗結果之濃度分布與本 文數值模擬結果進行比較。	37
圖 3.14 具有最佳化參數之混合器的混合指標，與使用商用標準 SMX 混合器元 件 ($Nx = 8$ 和 $Np = 3$)的結果比較。	38
圖 3.15 不同幾何結構參數，各個 SMX 靜態混合器之壓力降。(a)商業標準 SMX 混合器之結構， $Nx = 8$ 、 $Np = 3$ 和 $N\theta = 90^\circ$ 。(b)~(d)為根據最佳化參數所 模擬之 SMX 混合器之結構，(b) $Nx = 8$ 、 $Np = 4$ 和 $N\theta = 90^\circ$ (c) $Nx = 8$ 、 $Np = 5$ 和 $N\theta = 90^\circ$ (d) $Nx = 6$ 、 $Np = 3$ 和 $N\theta = 90^\circ$ 。	39
圖 3.16 不同幾何結構下，CMC 溶液中的濃度分布。	41
圖 3.17 不同幾何結構下，Guar Gum 溶液中的濃度分布。	41

圖 3.18	不同幾何結構下，甘油中的濃度分布。.....	41
圖 3.19	不同幾何結構下，橄欖油中的濃度分布。.....	42
圖 3.20	不同幾何結構下，水中的濃度分布。.....	42
圖 3.21	SMX+SCT 混合器之截面示意圖，紅色部份顯示 7 個檢視截面。截面所 在位置分別為： $2L, 3L, 4L, 5L, 6L, 7L$ 和 $8L$ ，其中 L 為單一混合元件的長 度，本例中設定 SMX 與 SCT 元件的長度均為 L 。.....	43
圖 3.22	SMX+SCT 混合器在不同突縮比下之濃度分布(在各個混合器元件出口截 面處)，並與 SMX 靜態混合器結果(最佳化案例： $Nx = 6$ 、 $Np = 3$ 和 $N\theta =$ 90°)作比較。.....	44
圖 3.23	SMX+SCT 混合器在不同突縮比下之混合指標(在各個混合器元件出口截 面處)，並與 SMX 靜態混合器結果(最佳化案例： $Nx = 6$ 、 $Np = 3$ 和 $N\theta =$ 90°)作比較。.....	44
圖 3.24	SMX+SCT 混合器在不同突縮比之壓力降，並與 SMX 靜態混合器(最佳 化設計)者作比較。(a)突縮比 1:4、(b)突縮比 1:16、(c)突縮比 1:36、(d)突縮 比 1:64、及(e) $Nx = 6$ 、 $Np = 3$ 和 $N\theta = 90^\circ$ 之 SMX 靜態混合器。.....	46
圖 3.25	SMX+SCT 混合器在突縮比為 1:16 時，不同突縮段長度下之濃度分布(在 各個混合器元件出口截面處)，並與純 SMX 元件混合器(最佳化設計)的結果 作比較。.....	48
圖 3.26	SMX+SCT 混合器在突縮比為 1:16 時，不同突縮長度之混合指標(在各個 混合器元件出口截面處)，並與純 SMX 元件混合器(最佳化設計)的結果作比 較。.....	48
圖 3.27	SMX+SCT 混合器在突縮比為 1:16 時，不同突縮長度之壓力降，並與純 SMX 元件混合器(最佳化設計)的結果作比較。(a)突縮長度 $1L$ 。(b)突縮長度 $L/2$ 。(c)突縮長度 $L/4$ 。(d)突縮長度 $L/8$ 。(e) $Nx = 6$ 、 $Np = 3$ 和 $N\theta = 90$ $^\circ$ 之純 SMX 元件混合器。.....	49
圖 3.28	非牛頓流體(CMC solution)之混合情形，“Experiment”為 Lim et al.[19]之	

實驗結果。本文採用兩種不同流體模型來執行混合的數值分析。.....	51
圖 3.29 變異數(CV)沿混合器無因次軸向距離(z/L)的變化,“Experiment”為 Lim et al.[19]之實驗結果。本文採用兩種不同流體模型來執行混合的數值分析,以反映實驗的真實情況。.....	53
圖 3.30 分離強度(I)沿混合器無因次軸向距離(z/L)的變化,“Experiment”為 Lim et al.[19]之實驗結果。本文採用兩種不同流體模型來執行混合的數值分析,以反映實驗的真實情況。.....	53
圖 3.31 混合指標(MI)沿混合器無因次軸向距離(z/L)的變化,“Experiment”為 Lim et al.[19]之實驗結果。本文採用兩種不同流體模型來執行混合的數值分析,以反映實驗的真實情況。.....	54
圖 3.32 第一法向應力差($N1$)隨著軸向距離改變的截面分布。本文採用兩種不同流體模型(Carreau Model 和 Giesekus Model)來執行混合的數值分析。.....	56
圖 3.33 第二法向應力差($N2$)隨著軸向距離改變的截面分布。本文採用兩種不同流體模型(Carreau Model 和 Giesekus Model)來執行混合的數值分析。.....	57
圖 3.34 SMX 靜態混合器在不同魏森貝格數(Wi)下的混合情形(在各個混合器元件出口截面處)。.....	61
圖 3.35 SMX 靜態混合器在不同魏森貝格數(Wi)下的混合指標(在各個混合器元件出口截面處)。.....	61
圖 3.36 SMX 靜態混合器在不同魏森貝格數(Wi)下的壓力降。(a) $Wi = 0.267$ (b) $Wi = 0.427$ (c) $Wi = 1.6$ (d) $Wi = 2.35$ 。選用的黏彈流體為 CMC 溶液。.....	62

表次

表 2.1	不同濃度之 CMC 溶液其在黏度方程式(2-1)所需輸入之參數值，本表錄自 Benchabane et al.[31]。	17
表 3.1	計算所選用之不同流體與其黏度	40
表 3.2	黏彈流體所輸入參數，本表數據取自 Lim et al.[19]及 Benchabane et al.[31]。	50
表 3.3	不同濃度之 CMC 溶液，其相關流體性質。	60

符號說明



D	圓管直徑
D_{SCT}	突縮圓管直徑
A_0	圓管截面積
A_c	突縮圓管截面積
L	混合器元件長度
l_c	突縮圓管元件長度
N_x	每一混合器元件，流道長度上的橫桿數量
N_p	每一混合器元件，平行截面上的橫桿數量
N_θ	相鄰兩橫桿之間的角度
$\dot{\gamma}$	剪切率
μ	流體黏度
μ_∞	剪切率無限大時，所量測之黏度
μ_0	剪切率為零時，所量測之黏度
μ_s	溶劑黏度
μ_e	聚合物黏度
λ	特徵鬆弛時間(relaxation time)
n	幂律指數(Power-Law index)
m	黏稠係數(Fluid consistency index)
a	過渡參數
ρ	流體密度
$\mathbf{u}$	速度場
u	x 方向之速度
v	y 方向之速度
w	z 方向之速度

U_0	平均速度
t	時間
p	動壓力(dynamic pressure)
F	體積力
τ	額外應力張量
I	二階單位張量
S	應變率張量(strain rate tensor)
T_e	彈性應力張量
T_{em}	第 m 個模式的彈性應力張量
f_r	鬆弛函數(relaxation function)
f_p	黏度因子(viscosity factor)
C	物種莫耳濃度
R	物種反應項
J	濃度的擴散通量向量
D_{AB}	物種 A 在物種 B 內的擴散係數
MI	混合指標(Mixing Index)
Wi	魏森貝格數(Weissenberg number)

第一章 緒論



1.1 簡介-黏彈流體

黏彈流體(又稱聚物流體)是同時具有黏性以及彈性兩種特性的流體。所謂彈性是指材料能夠回復到原始形狀的能力；而流體則是指能夠呈現其所處容器形狀的材料，不具有原始的形狀。這種明顯的矛盾正好能展現聚物流體的流動情形，可透過「彈性」來描述本構方程式(constitutive equation)中的非線性或時間相關的效應[1]。黏彈流體因其含有高分子量的分子並具有許多內部自由度，其流體行為與牛頓流體有定性上的不同。黏彈流體的黏度會隨速度梯度的變化而改變，不保持恆定值。此外，黏彈流體在剪切流動中，存在非零且不相等的法向應力，這是在牛頓流體中不會觀察到的[2]。

黏彈流體在流動中的許多效應，可歸因於流體在剪切流動中表現出的法向應力差。如果流體僅沿一個坐標方向移動，且其速度僅在另一個坐標方向上變化，則吾人稱流動速度方向為 1；速度變化方向為 2；剩下的最後一個方向為 3。透過這些方向的設定，可以瞭解法向應力差的關係式，第一法向應力差的關係式為 $\sigma_{11} - \sigma_{22}$ ，第二法向應力差的關係式為 $\sigma_{22} - \sigma_{33}$ 。對於牛頓流體，剪切流動中的法向應力差正好為零[1]。

如同上述，黏彈流體因其具有固體般的彈性效應，會受到流動歷史的影響，即所謂的記憶效應(memory effect)，這種效應使黏彈流體的行為與牛頓流體有很大不同，產生各種獨特現象。例如爬桿效應(又稱魏森貝格效應)[3]、無管虹吸現象[4]、液體彈跳(又稱凱伊效應)[5]、剪切稀化／增稠[6]等。其中非線性的彈性效應，因為慣性力可忽略不計，在微流體控制系統中的應用特別顯著。在低雷諾數下，能產生彈性不穩定和紊流，從而在流道中實現高效率的混合[7]。

在製造塑膠以及作為潤滑劑、食品和墨水的添加劑中，都會遇到聚物流體，因此黏彈流體的混合非常重要。本研究的結果將有助於深入瞭解黏彈流體在流道的行為，並為工業應用中的流體混合領域提供有價值的參考。



1.2 簡介-靜態混合器

在工業製程中，複雜流體的產品配製帶來了許多挑戰。許多常見的多相(multiphase)產品，例如油漆、墨水或是陶瓷油膏，通常具有高程度的固體顆粒，體積比例為 45~55%。在剪切條件下，固體顆粒經常發生堵塞，導致高黏度或是黏彈性的流變特徵。由於這類型之流體具有高度黏稠的特性，在工業混合的操作上，都會在層流的狀況下進行混合，這對實現均勻性提出了挑戰。傳統上會使用專門設計的攪拌器進行攪拌，以執行聚物流體的混合任務。然而，動力式的攪拌有許多缺點，例如高耗能、操作員干預以及清潔過程而導致的高成本[8]。

在上述的挑戰下，靜態混合器(又稱為無動力混合器)成為混合製程工業中的標準設備，也是近年來重要的研究課題。典型的靜態混合器設計是一系列相同且不具動力的插入件(稱之為元件)，將其安裝在管道或是反應器當中。這些相同的元件能在主流方向之外的方向，例如徑向以及切向上重新分配流體，而流體重新分配的效果取決於特定的混合器設計和元件的數量[9]。市面上的靜態混合器有各種幾何結構(如圖 1.1 所示)和許多可調整之參數，以針對特定應用來進行混合最佳化[10]。

靜態混合器在工業中最常見的用途是混合互溶之流體，不論是兩種不同流體、多種不同流體或是會產生化學反應的反應流體，都能透過靜態混合器來減少甚至是消除混合的濃度梯度[11]。此外，靜態混合器通過重力填料的方式，還可用於混合顆粒固體，例如穀物、麵包、蛋糕粉以及混凝土的混合[12]。

與傳統的機械式攪拌器相比，靜態混合器提供了許多優勢，其中包含空間需求小、設備運行和維護成本低、流體停留的時間分布短、生成的副產物少、安全性高以及可透過等溫的操作來提高選擇性等，這些優點促進了靜態混合器在化工、製藥、食品加工、聚合物合成、以及石化工業中的應用[10]。在層流條件下，流體間的混合通常較為困難，而靜態混合器則是一種實用的混合工具。因此本研究將通過計算流體力學(CFD)來探討混合器內部的混合現象。



KMX-V (Chemineer, Inc.)



SMX (Sulzer, Inc.)



Custody Transfer (Komax Systems, Inc.)



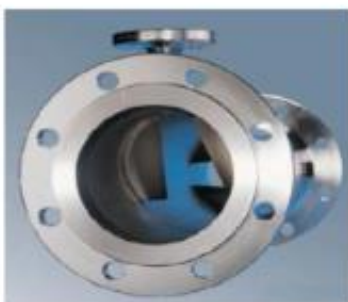
Standard LPD (Ross Engineering, Inc.)



Kenics KM (Chemineer, Inc.)



ZT-MX (ZelenTech, Ltd)



SMI (Sulzer, Inc.)



Corrugated channel reactors
(Laboratory pilots)

圖 1.1 市面上的各種靜態混合器。本圖錄自 Ghanem et al.[10]。



1.3 文獻回顧

在 1981 年，Yasuda et al.[13]探討了線性和星狀聚苯乙烯濃溶液的剪切流動特性。該研究測量單分散和多分散聚苯乙烯溶液的線性黏彈性和黏度函數，並使用修改過的 Carreau 黏度方程式(文獻中稱 Carreau- Yasuda 方程式)來分析分子結構對於流變特性的影響。結果發現零剪切速率黏度、臨界剪切速率以及幂定律(Power-Law)之斜率都與溶液濃度和分子量相關。此外，減少的穩態順應性在各種條件下是一致的，並且對於星狀的聚苯乙烯沒有觀察到增強效果。

在 1982 年，Giesekus[14]根據變形相關的張量移動率(tensorial mobility)，提出了一個聚物流體的本構方程式(constitutive equation)，可用於建模濃縮的聚合物溶液和聚合物熔體。該理論能應用於簡單的拉伸流動和剪切流動，可預測剪切稀化(shear thinning)、法向應力差(normal-stress differences)和拉伸黏度等狀況。因其本構方程式包含應力、應變和配置張量(configuration tensors)，能準確預測實驗中觀察到的複雜流動行為。

在 2006 年，Liu et al.[15]使用粒子追蹤法來視覺化流體的混合過程，並透過引入適當的表觀應變率(apparent strain rate)來計算非牛頓流體的壓力損失，藉以探討非牛頓流體在 SMX 靜態混合器(如圖 1.2 所示)中的混合表現。該研究發現剪切稀化流體相比於牛頓流體具有更好的混合狀況和較低的壓力損失。此外也討論了壓力損失和摩擦因子隨雷諾數和幂律指數(Power-Law index)變化的關係。

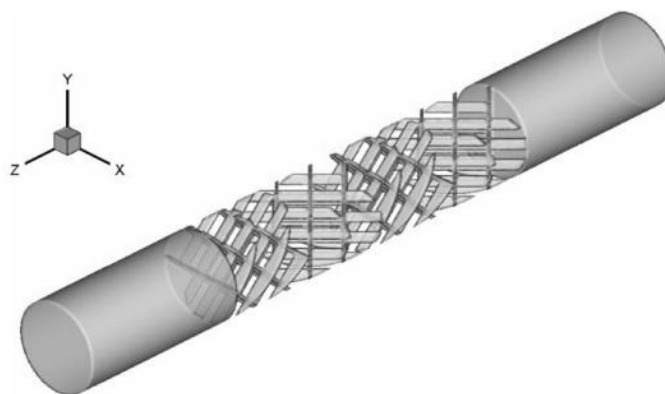


圖 1.2 標準 SMX 靜態混合器的幾何結構。本圖錄自 Liu et al.[15]。

在 2006 和 2007 年，Gan et al.[16][17]研究在微通道中混合黏彈流體的有效方法。第一項研究使用具有突縮流道的微型裝置，在低雷諾數(Reynolds number)和高狄波拉數(Deborah number)下，進行聚甲基丙烯酸甲酯(poly methyl methacrylate，縮寫為 PMMA)的混合。該裝置促使流體的彈性效應出現，從而增強流道中的混合表現。第二項研究使用具有突縮的矽玻璃微型流道(如圖 1.3 所示)，探討不同的雷諾數和狄波拉數的混合情形，並利用螢光染劑和微型顆粒來視覺化流體的運動。兩項研究都發現突縮流道可利用彈性引起的流動不穩定性，其所引致的混合遠大於對流和擴散效應者，在非常低的雷諾數下也能實現有效的混合。

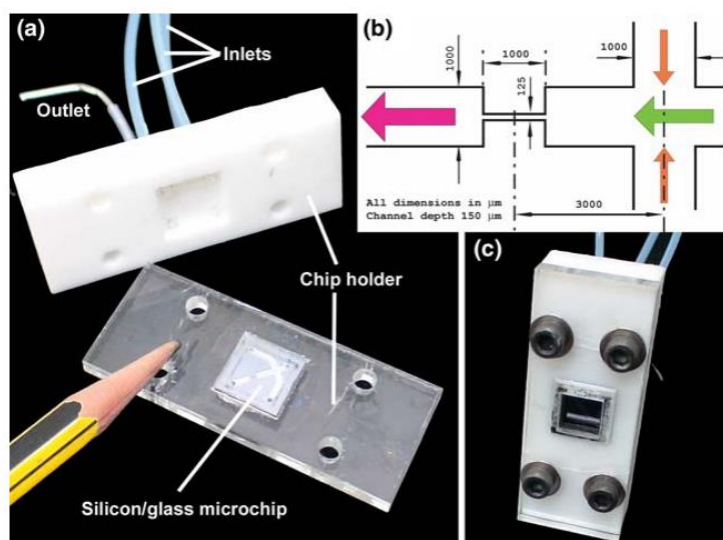


圖 1.3 矽玻璃微型流道。本圖錄自 Gan et al.[17]。

在 2009 年，Singh et al.[18]利用映射方法(Mapping Method)來分析 SMX 靜態混合器，其混合元件是由三維排序方式的互連橫桿所組成。該研究主要針對 SMX 混合元件的三個幾何參數作最佳化設計，三個參數分別為 N_x , N_p , N_θ 。其中 N_x 為每一單位元件，沿著流道寬度(即 x 方向)的橫桿數量； N_p 為每一單位元件，沿著流道(即 z 方向)的橫桿數量； N_θ 為相鄰兩橫桿之間的角度，具體例子如圖 1.4 所示。考慮圖 1.4(a)， $N_x = 4$ 、 $N_p = 3$ 、 $N_\theta = 90^\circ$ 之範例，若沿 x 方向觀察此元件，會看到由平行橫桿所組成的特定 yz 平面。標記為“1”的橫桿顯示於第一個平面，標記為“2”的橫桿顯示於第二個平面，並以此類推。總共有四個含有平行橫桿的特定 yz 平面，

故 $N_x = 4$ 。接著觀察每個特定 yz 平面，其為三個平行橫桿所組成，故 $N_p = 3$ 。按該研究的計算和分析結果，Singh et al.[18]提出了一條 SMX 混合器的設計公式，為 $N_p = \frac{2}{3}N_x - 1$ ，過度增加 N_x 會導致流體界面拉伸不足，而減少 N_x 會導致流體界面過度拉伸。通過調整混合器的設計參數，展現其混合效率的顯著改進，對於流體的連續性混合十分重要。本研究將針對該公式的適用性，以稀薄質傳法作深入探討。

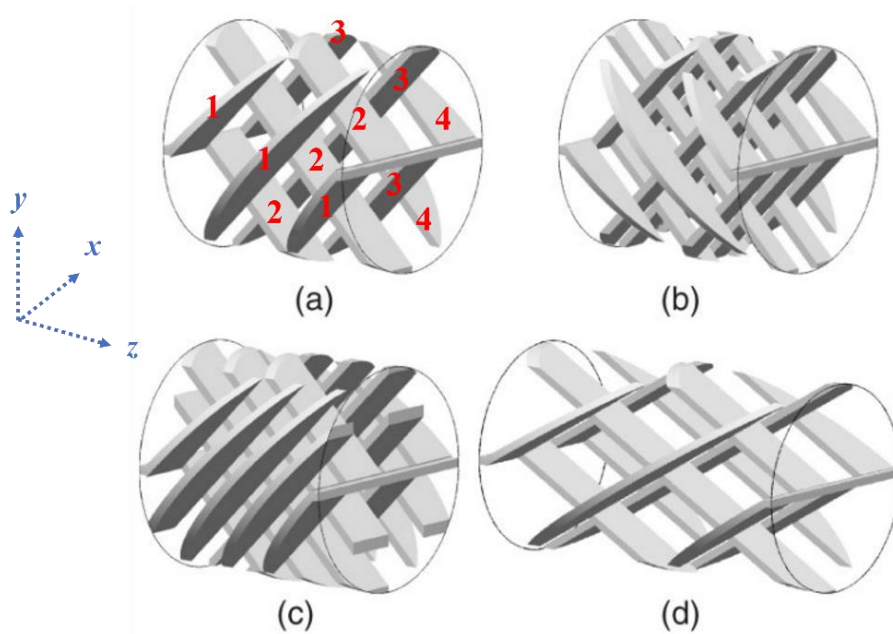


圖 1.4 SMX 靜態混合器之幾何結構參數：(a) $N_x = 4$ 、 $N_p = 3$ 、 $N_\theta = 90^\circ$ (b) $N_x = 7$ 、 $N_p = 3$ 、 $N_\theta = 90^\circ$ (c) $N_x = 4$ 、 $N_p = 5$ 、 $N_\theta = 90^\circ$ (d) $N_x = 4$ 、 $N_p = 3$ 、 $N_\theta = 120^\circ$ 。本圖錄自 Singh et al [18]。

在 2015 年，Lim et al.[19]利用磁振造影(MRI)技術來研究 SMX 靜態混合器中的混合行為。結果顯示 MRI 可用於分析流體混合過程。在層流條件下，牛頓流體(甘油溶液)的混合狀況比非牛頓流體(1%的羧甲基纖維素水溶液(CMC solution)，本文簡稱之為 CMC 溶液)更好。透過 MRI 所計算的混合指標(Mixing Indices)和空間定位數據(spatially localized data)，可對流體進行定性和定量的分析，對於預測混合器的性能和改善工業製程十分重要。本文的混合計算結果將與 Lim et al.[19]的實驗結果作驗證。

在 2016 年，Mihailova et al.[20]利用正電子發射粒子追蹤(PEPT)技術來研究 SMX 靜態混合器內的流體行為。該研究比較了牛頓流體和非牛頓流體的速度分佈。結果顯示混合器內的軸向速度保持正值，沒有逆向混合現象，且兩種流體顯示出相似的速度模式。至於混合器內的徑向速度則受到橫截面的幾何結構影響，顯示出單峰或是雙峰分佈。這項研究強調了 PEPT 在複雜的幾何結構中，能有效的視覺化其流動，為工業製程提供了重要的參考。

在 2018 年，Zhang et al.[21]在流道入口使用正弦信號控制驅動壓力，探討在 T 形結構(如圖 1.5 所示)提高黏彈流體混合效率的方法。該研究使用模擬軟體比較不同的壓力條件下，牛頓流體和黏彈流體的混合表現。結果表明，當 T 型結構兩入口處的調節壓力相位差為 180° 時，黏彈流體的混合度可高達 0.9。除了數值分析，該研究也利用實驗來驗證混合結果，為工業製程提供一種實用的方法。

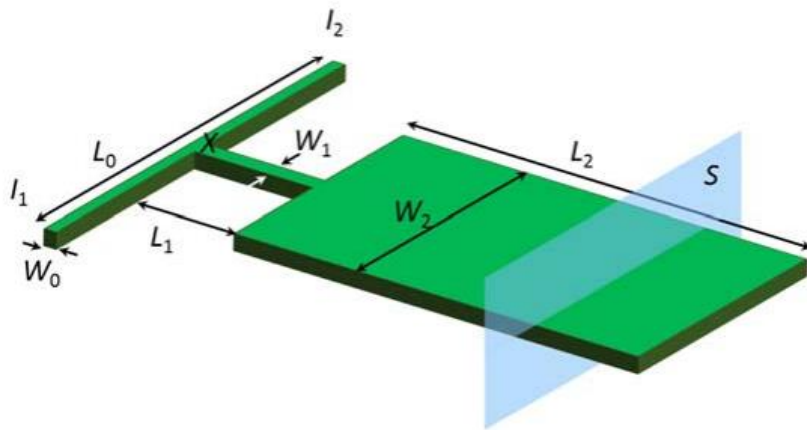


圖 1.5 T 形結構混合器。本圖錄自 Zhang et al.[21]。

在 2021 年，Migliozzi et al.[22]利用平面雷射誘導螢光(PLIF)技術來研究靜態混合器中彈性不穩定性的發生及其對於混合效率的影響。主要探討兩種混合器的幾何結構，分別為 Kenics 螺旋混合器和 SMB-R 靜態混合器；以及三種不同的聚合物溶液。研究發現當狄波拉數超過 1 時，會發生彈性不穩定性，導致與牛頓流體的混合模式有顯著差異，而且不穩定性與幾何結構相關，會在流動中產生不穩定的混沌波動造成混合效率降低。



在 2022 年，Michael et al.[23]採用實驗方法和計算流體力學(CFD)模擬，探討各種複雜流體(包括黏彈流體和非黏彈流體)在 SMX 靜態混合器中的流動行為。該研究發現傳統的摩擦因子相關式，隨著雷諾數的增加會高估黏彈流體的壓力損失，並瞭解到混合器內部的流動對於混合表現的重要性。此外，該研究也使用 CFD 模擬對兩種不同類型之流體，提供壓力損失的精準預測。

在 2024 年，John et al.[24]使用計算流體力學(CFD)模擬 Kenics 螺旋混合器中的黏彈流動，探討不同雷諾數和魏森貝格數對於混合表現的影響。結果發現流體的黏彈性增加，會導致混合器元件交叉處的流動產生不對稱分叉，進而降低混合器的混合狀況。該研究也說明對於低雷諾數和魏森貝格數，流動不對稱性與黏彈性呈正相關，而當雷諾數和魏森貝格數提高，黏彈模型中的可伸展性會導致流動行為發生急劇變化，使模擬從穩態轉變為暫態。

1.4 研究動機

在工業製程中，靜態混合器因其無需動力、操作簡便且維護成本低的優勢，被廣泛應用於各種流體的混合製程。常見的一個挑戰是需要將高黏度差異的兩股流體進行有效混合。高黏度會降低流道中的流速，使雷諾數(Reynolds number)變得非常小，難以達到紊流狀態。在層流場中，由於缺乏強慣性力所引發的擾動，流體混合較為困難。靜態混合器能夠將流體動能轉換成混合能量，使流體在管道內旋轉、分散、剪切並不斷改變流動方向，從而實現最佳的徑向混合效果。

具有高彈性的黏彈流體在混合過程中更具優勢，因其在變形後能快速恢復形狀，減少混合製程中的能量耗散，有助於保持流體的流動剖面，從而以更少的能量輸入達到更有效的混合。然而，對於這類具有複雜流變特性的黏彈流體，其混合行為和機制存在許多未知的挑戰。由於同時具備黏性和彈性，黏彈流體在混合過程中會表現出與牛頓流體截然不同的行為，這些流體在流動中可能會產生次級流動或流動不穩定，使得流道混合變得更加複雜且難以控制。



隨著科技不斷的進步和對流體力學的深化理解，數值模擬技術為研究黏彈流體行為提供一個強而有力的工具。通過數值模擬，可以精確地分析混合器內部的流動和濃度分布。本實驗室白翊宏[25]、賴泓翰[26]、賴冠廷[27]就透過 COMSOL Multiphysics 軟體[28][29][30]的協助，對 Gan et al.[16][17], Lim et al.[19], Mihailova et al.[20], Zhang et al.[21], Migliozi et al.[22]等案例進行數值計算，以驗證模擬之準確性。其中使用該軟體的稀薄質傳法，以探討流道內的混合現象。本研究與實驗室先前研究的不同之處在於，吾人將著重黏彈流體在工業混合中的應用，透過突縮管在微流道混合中的效果，進一步探討其在工業尺度上對於流體混合的影響。

本研究旨在利用計算流體力學(CFD)技術，系統性研究黏彈流體在靜態混合器中的混合機制，探討不同幾何參數、不同流體、不同混合元件、不同流體模型以及不同程度的彈性效應對混合情形之影響。研究結果將為設計更高效的靜態混合器提供理論基礎，進一步提升工業流程中的混合效率，降低能耗和操作成本。這不僅對於化工、製藥和食品加工等傳統工業有重要意義，還可推動新興領域如生物工程和材料科學中的應用。通過本研究，期望能為黏彈流體的混合提供新的見解，並促進相關工業技術的創新和發展。

第二章 理論模型



2.1 物理模型與基本假設

2.1.1 SMX 靜態混合器

本研究將對 SMX 靜態混合器(Static Mixer)內的流場及濃度場進行計算，SMX 靜態混合器的幾何結構如圖 2.1 所示，與其他連續型靜態混合器一樣，由多個相同的混合元件(mixing element)串連而成、並置放於圓管中(參考圖 2.1)，但相鄰的兩個元件其第二個元件的放置方位與第一個元件者在切線方向上相對旋轉了 90 度，圖 2.1 為共有四個混合元件的混合器例子，在實際應用上可依照需求來放置其他數目的元件。就單一 SMX 混合器元件而言，沿混合器軸向觀察，可見到多個 X 形交叉相連的橫桿橫互在其前方，這些對立橫桿之間的角度(θ)多為 90 度，橫桿的數目文獻中以 N_x 表示。流體流經第一層橫桿後，會流經數層再流入下一個混合器元件，每一元件的層數以 N_p 表示。在此， θ 、 N_x 和 N_p 被稱為 SMX 混合器的幾何參數。如圖 2.1 所示的標準 SMX 元件，其 $N_x = 8, N_p = 3, \theta = 90^\circ$ 。就靜態混合器的操作上，在混合器上下游施加壓力差來促使流體流經混合器。如果以拉格朗日的觀察方法(Lagrangian description)隨著流體穿過圓管移動，會感受到交叉橫桿像縱橫交錯的梳子一樣，從一個壁面移動到另一個壁面。在混合器入口處，兩種待混合流體分別處於通道左半面及右半面，其界面會被這八個橫桿所觸及，導致流體界面在通過第一個元件時被拉伸和摺疊了八次。當流體通過第二個旋轉 90 度的混合器元件時，在第一個元件中形成的所有流體界面進行了垂直方向的拉伸和摺疊，不斷重複此過程最終導致界面面積的增長，促使流體的混合[18]。

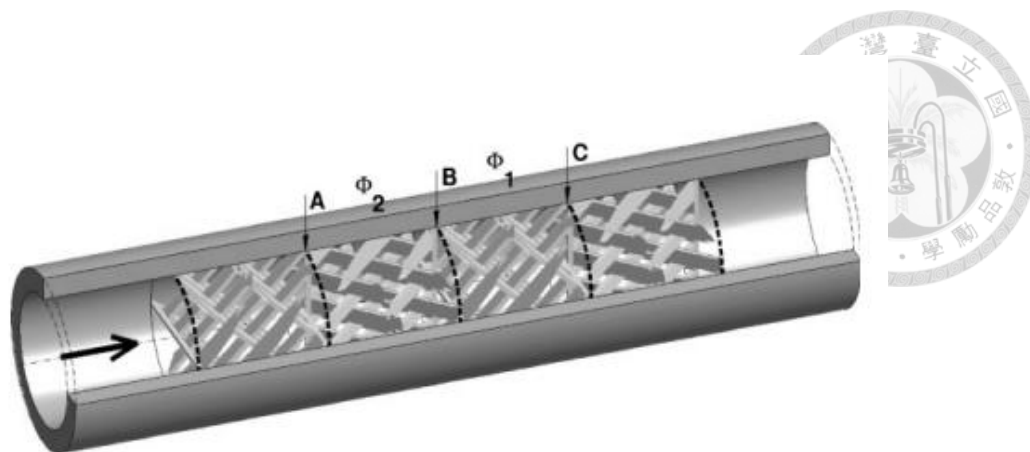
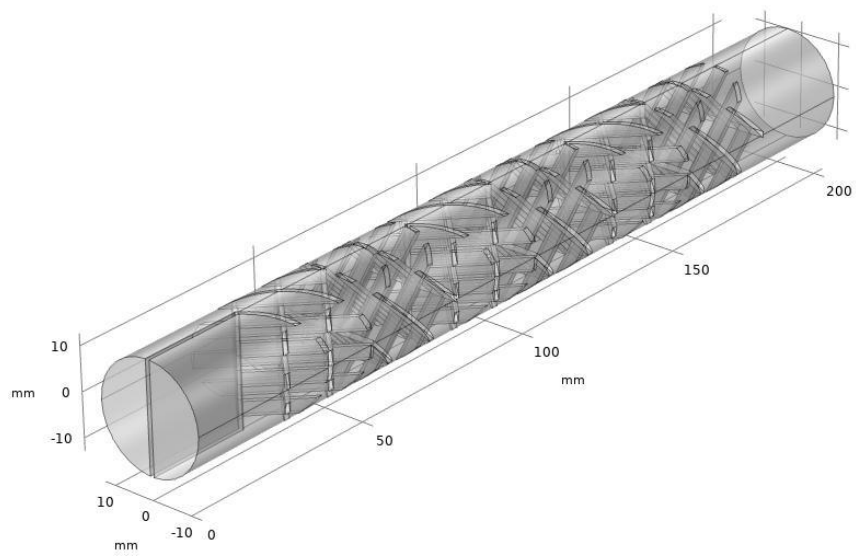
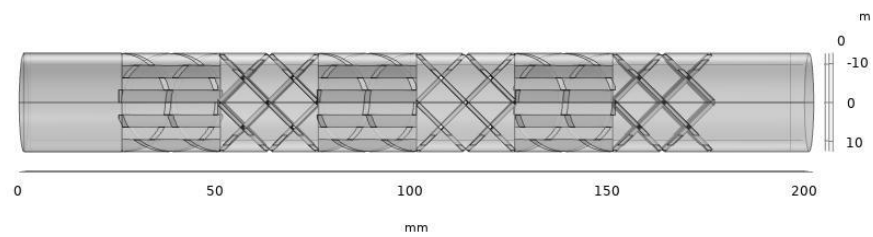


圖 2.1 標準 SMX 四元件靜態混合器，其 $N_x = 8$, $N_p = 3$, $\theta = 90^\circ$ 。本圖錄自 Singh et al.[18]。

本文模擬 SMX 靜態混合器時，將先採用文獻 Lim et al.[19]的實驗中所使用的幾何尺寸進行計算，其圓管直徑 D 為 25.4mm、單一混合器元件長度 L 為 25.4 mm，直徑與長度之比值為 $L/D = 1$ ；至於元件內部，單一橫桿長度為 40mm、寬度為 3.18mm、厚度為 1mm。所使用之 SMX 靜態混合器共有 8 個元件，總長度為 203.2mm(意即 $8L$)，其中第一個元件與最後一個元件為緩衝區(Buffer Region)，未放置任何交叉橫桿，中間的六個元件參數為 $N_x = 8$, $N_p = 3$, $\theta = 90^\circ$ 。當液體進入混合器後，它們會經過混合器內部的各個單元元件以及圓柱空間，但不會穿透圓柱體的管壁和單元壁面。SMX 混合器模型如圖 2.2 所示，其中包含三維及二維的透視圖。待計算與實驗結果驗證無誤後，再對其他 N_x, N_p, θ 值進行最佳化參數分析。



(a)



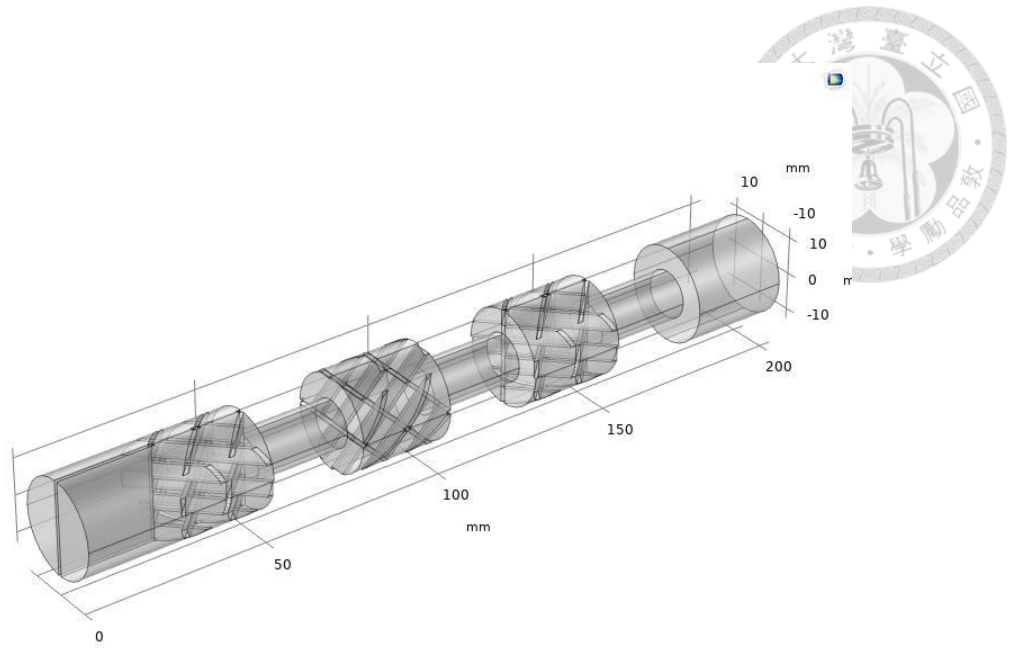
(b)

圖 2.2 SMX 靜態混合器：(a) 三維立體透視圖。(b) 二維側面透視圖。圖為本研究所建構於 COMSOL 計算軟體之模型。

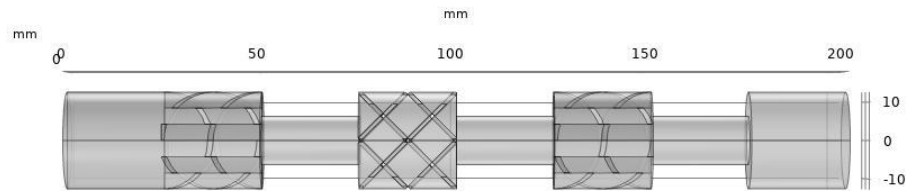


2.1.2 SMX+SCT 混合器

本研究除了對 SMX 靜態混合器進行數值計算外，還將突縮圓管(Sudden Contraction Tube)作為混合元件(本文簡稱為 SCT 元件)，結合於 SMX 靜態混合器中，稱之為 SMX+SCT 混合器。透過突縮管引入更多流體的彈性效應，吾人可以計算內部的流場及濃度場，以瞭解流道內部的混合變化。SMX+SCT 混合器的幾何結構將延續前一小節所述，模擬使用的混合器總共有 8 個元件，總長度為 203.2mm(意即 $8L$)，其中單一混合器元件長度 L 為 25.4mm，而第一個元件與最後一個元件為緩衝區(Buffer Region)，未放置混合元件。與前一小節的幾何結構不同的地方在於，混合器內部第二、四、六個元件為 SMX 元件；第三、五、七個元件為 SCT 元件，其中混合器入口處的圓管直徑與 SCT 突縮圓管的直徑之比值為 D_{SCT}/D ；截面積的比值，意即突縮比(Contraction Ratio) $A_c/A_0 = D_{SCT}^2/D^2$ 。本文將透過調整不同的突縮比 A_c/A_0 以及不同突縮圓管的元件長度 l_c ，研究混合器內部的混合變化。SMX+SCT 混合器模型如圖 2.3 所示，其中包含三維及二維的透視圖。



(a)



(b)

圖 2.3 SMX+SCT 混合器：(a)三維立體透視圖。(b)二維側面透視圖。圖為本研究所建構於 COMSOL 軟體之模型。本例 $D_{SCT}/D = 1/2$ ， $A_C/A_0 = 1/4$ 。



2.1.3 基本假設

本研究針對層流情況進行數值計算和模擬分析。假設流體為不可壓縮流體，採用稀薄質傳法(Transport of Diluted Species Method)來探討低雷諾數下之流體在靜態混合器和突縮流道中的混合情況。吾人通過求解質量守恆方程式(Continuity Equation)和動量方程式(Momentum Equation)來獲得流道內的三維流場和壓力場，然後將已獲得的流場與稀薄質傳法耦合起來計算質量的傳輸，以瞭解流體混合的情況。稀薄質傳法包含對流和擴散兩種效應，本研究如同文獻 Lim et al.[19]的實驗方式，主要針對兩股相同的流體進行模擬，其中一股流體的稀薄物質濃度設定為 10(arbitrary unit)，而另一股流體的物質濃度設定為 0。至於流體的擴散係數，將其設定為可忽略之數值($10^{-14}[\text{m}^2/\text{s}]$)，這樣能夠專注於混合器因其複雜的幾何結構而引發的對流混合效果。而在本文的計算過程中，沒有考慮到熱傳效應。

2.2 流體性質

本研究模擬之流體為 Lim et al.[19]文獻中採用的非牛頓流體，該流體為羧甲基纖維素(Carboxymethyl Cellulose)和去離子水(DI water)所配製之溶液，濃度為 1%，稱為 1% CMC 溶液，吾人將於本小節詳細介紹模擬所選用之流體模型，以便準確地描述其流動行為。

2.2.1 流體模型

在計算非牛頓流體的流動時，由於 CMC 溶液具有剪切稀化的效果，與牛頓流體不同，其應力與應變率不再成線性關係，因此本研究使用 Carreau-Yasuda 模型 [13]來擬合非牛頓流體的黏度。Carreau-Yasuda 模型的方程式為：

$$\mu(\dot{\gamma}) = \mu_{\infty} + (\mu_0 - \mu_{\infty})(1 + (\lambda\dot{\gamma})^a)^{(n-1)/a}, \quad (2-1)$$

其中， μ_{∞} 為當剪切應變率 $\dot{\gamma}$ 趨近於無限大時，所量測之黏度； μ_0 為當剪切應變率 $\dot{\gamma}$ 為零時，所量測之黏度；而 λ 為特徵鬆弛時間(relaxation time)； a 為一過渡參數值， n 為冪律指數(Power-Law index)。在 Lim et al.[19]文獻中採用之非牛頓流體模型為冪定律(Power-Law)，其方程式為：

$$\mu(\dot{\gamma}) = m\dot{\gamma}^{n-1}, \quad (2-2)$$

其中， m 為黏稠係數(Fluid consistency index)； n 為冪律指數。Lim et al.[19]按照其量測結果，(2-2)式中取 $m = 3.35 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$ 和 $n = 0.60$ ，其剪切應變率 $\dot{\gamma}$ 採用方程式 $\dot{\gamma} = 64 \langle v \rangle / D$ ，其中 $\langle v \rangle$ 為混合器內平均流速， D 為混合器內徑。因本研究欲了解剪切效應((2-1)及(2-2)均有考慮而可以採用作為計算)和彈性效應(與 λ 有關)對混合的影響，需選用適當的鬆弛時間常數 λ ，才可將採用(2-1)或(2-2)的計算結果(主要考慮剪切效應者)與後續要採用的黏彈流體模型(即 Giesekus 模型，兼顧剪切效應與彈性效應)計算結果相互比較。根據 Bird et al.[1]所論述，Carreau-Yasuda 模型和冪定律模型能互相轉換，故參考另一篇文獻 Benchabane et al.[31]的結果，其量測不同濃度的 CMC 溶液(0.2%~6%)，求出 Carreau-Yasuda 模型中的各個參數值，結果如表 2.1 所示，其中 1% 的 CMC 溶液即為 Lim et al.[19]實驗所採用者，本文大部份的計算均採用此款流體的數據進行模擬。

表 2.1 不同濃度之 CMC 溶液其在黏度方程式(2-1)所需輸入之參數值，本表錄自 Benchabane et al.[31]。

CMC(%)	λ (s)	n	μ_0 (Pa*s)	μ_∞ (Pa*s)
0.2	0.010	0.67	0.019	0.001
0.4	0.016	0.65	0.045	0.001
0.8	0.060	0.60	0.230	0.002
1.0	0.088	0.61	0.530	0.003
1.5	0.172	0.64	1.970	0.020
2.0	0.287	0.66	6.355	0.024
2.5	0.530	0.69	21	0.038
3.0	0.865	0.69	48	0.040
4.0	1.026	0.68	70	0.040
5.0	1.804	0.67	200	0.045
6.0	3.459	0.67	700	0.060

在黏彈流體的模型(兼顧剪切和彈性效應)選用方面，COMSOL 計算軟體 [28][29]提供了多種不同的組成率方程式讓使用者根據自身不同的流體性質，來模擬黏彈流體，常見的有 Oldroyd-B 模型、Giesekus 模型、FENE-P 模型以及 FENE-CR 模型等。這些模型根據不同的基本假設和組成率方程式，描述黏彈流體的黏滯力、應力與應變之關係以及流體的流動行為。本研究選用 Giesekus 模型作為黏彈流體的組成率方程式，根據文獻 Giesekus[14]所論述，其可用於模擬剪切稀化流體，並預測法向應力差，適合本研究對於 CMC 溶液流動模擬之需求。

Giesekus 模型是一種用於描述特殊流體(如黏彈流體)行為的數學模型。文獻中以其作者 Giesekus 的姓氏命名[14]。該模型是上對流馬克士威爾模型(upper-convected Maxwell model)的延伸，專門用於描述非牛頓流體中的彈性效應。它通過

將流體的分子動力和分子結構變形引入到偏微分方程中，提供一種方式來敘述非牛頓流體的流動。Giesekus 模型由兩個微分方程式所組成，用於闡釋流體應力與應變之關係，其中一個方程式表達了流體的可恢復性，另一個則表達了聚合物鏈在流體中的運動。

藉由引入一個額外的參數，即 Giesekus 常數或稱鬆弛時間常數，Giesekus 模型能夠更精確地預測一些複雜流動情況中的應力場和速度場分布，使其在非牛頓流體研究中獲得了廣泛應用。總體而言，Giesekus 模型是一個用於黏彈流體研究的重要工具，可用於幫助理解複雜流動中的流變行為，並對流變行為的數值模擬提供更好的解釋，本文將於 2.3 節詳細介紹 Giesekus 模型的方程式。

本文在 3.1 至 3.4 節中將採用 Carreau-Yasuda 模型(其計算結果與使用幂定律計算結果幾乎相同)進行計算，在 3.5 節中採用 Giesekus 模型來進行計算，並與 Carreau-Yasuda 模型計算結果進行相互比較，二者的差異可助了解彈性效應對混合的影響。另由該兩項模型所獲計算結果亦將與文獻中的實驗結果作比較，以了解該兩項模型的適用性及應用上的各自優勢。

2.3 統御方程式

2.3.1 內部流場

本節將討論在數值模擬中描述流體運動的數學方程式，首先需要考慮的是連續(質量守恆)方程式(Continuity equation)和動量守恆方程式(Momentum Equation)。連續方程式用於描述流體在運動過程中質量守恆的特性，而在涉及牛頓流體時，動量守恆方程式即為 Navier-Stokes 方程式，其應力與應變率呈線性關係。對於黏彈流體，則需引入適當的組成律方程式(上述的 Giesekus 模型)來描述其非牛頓流體的特質，黏彈流體的應力和應變率之間具有非線性關係，使得其運動行為更加複雜。假設流體為不可壓縮流體，速度場 $\mathbf{u}$ 及壓力場 p ，滿足以下方程式

連續方程式(Continuity equation)：

$$\rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2-3)$$



動量守恆方程式(Momentum equation)：

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}] + \mathbf{F}, \quad (2-4a)$$

其中 ρ 為流體密度； $\mathbf{u}$ 為速度場； t 為時間； p 為動壓力(dynamic pressure)； $\mathbf{I}$ 為二階單位張量； $\mathbf{F}$ 為體積力，即為空間中作用在所有流體元素上的非接觸力，例如重力、靜電力和磁力等； $\boldsymbol{\tau}$ 為額外的應力張量(extra stress tensor)，即黏性應力和彈性(或稱黏彈性)應力的總和，其方程式表示為：

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu_s \mathbf{S} + \mathbf{T}_e, \quad (2-4b)$$

其中 μ_s 為溶劑(不包含聚合物分子之液體)的黏度； $\mathbf{S}$ 為應變率張量(strain rate tensor)；其方程式表示為：

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T), \quad (2-4c)$$

其中 $(\nabla \mathbf{u})^T$ 為 $\nabla \mathbf{u}$ 的轉置張量。延續(2-4a)式的說明， $\mathbf{T}_e$ 為彈性(或稱黏彈性)應力張量，為一對稱張量。為了充分描述具有複雜流變行為的流體流動，對稱應力張量 $\mathbf{T}_e$ 表示為各個模式(modes)的總和，其方程式表示為：

$$\mathbf{T}_e = \sum_m \mathbf{T}_{e_m}, \quad (2-4d)$$



其中 $\mathbf{T}_{e_m}$ 為第 m 個模式的彈性應力張量，為了完成方程式系統，需要每個模式的本構關係。吾人可透過不同的應變數來制定本構關係，根據 COMSOL 的操作手冊 [28][29]，其使用應力形式的雙曲偏微分傳輸方程式(Hyperbolic partial differential transport equation)來作為本構模型，其方程式表示為：

$$\frac{1}{2\mu_{e_m}} \mathbf{f}_{r_m}(\mathbf{T}_{e_m}) + \frac{\lambda_{e_m}}{2\mu_{e_m}} \mathbf{T}_{e_m} \cdot \nabla = f_{p_m}(\mathbf{T}_{e_m}) \mathbf{S}, \quad (2-4e)$$

其中 $\mathbf{f}_r$ 和 f_p 分別為鬆弛函數(relaxation function)及黏度因子(viscosity factor)，兩者都是彈性應力張量 $\mathbf{T}_e$ 的特定函數，依照不同的組成率方程式而異； λ_e 為鬆弛時間(relaxation time)； μ_e 為聚合物的黏度； $\mathbf{S}$ 如同上述，為應變率張量；而 $\nabla_{\mathbf{T}}$ 為上對流導數運算子(upper convective derivative operator)，其方程式表示為：

$$\nabla_{\mathbf{T}} = \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{T} - [(\nabla \mathbf{u}) \mathbf{T} + \mathbf{T}(\nabla \mathbf{u})^T]. \quad (2-4f)$$

如同 2.2.1 節所述，本研究選用 Giesekus 模型作為黏彈流體的組成率方程式，其模型可用於模擬半稀釋和濃縮聚合物的流動。其對應的鬆弛函數以及黏度因子可表示為：

$$\mathbf{f}_{r_m} = \left(1 + \alpha_{e_m} \frac{\lambda_{e_m}}{\mu_{e_m}} \mathbf{T}_{e_m} \right) \mathbf{T}_{e_m}, \quad f_{p_m} = 1, \quad (2-4e)$$

其中 α_e 為無因次移動率因子(dimensionless mobility factor)，會影響流體的鬆弛時間與應力分布。本文數值設定為 0.25，確保模擬結果可收斂到穩態。

上述(2-4a)式如經長時間過後，可用以求解穩態的速度場和壓力場。



2.3.2 稀薄質傳法

本研究將利用連續方程式(Continuity Equation)和動量方程式(Momentum Equation)所求得之三維流場，以稀薄質傳法(Transport of Diluted Species)來計算流道內物質的濃度場，瞭解流體的混合現象。吾人將使用物種連續方程式(Continuity Equation for Species in Molar Quantities)，即為質傳方程式，探討物種 A 在物種 B 的傳輸(假設流道僅含有兩個物種)，則質傳方程式表示如下：

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} + \mathbf{u} \cdot \nabla C_A = R_A, \quad (2-5a)$$

其中 C_A 為物種 A 的莫耳濃度； $\mathbf{u}$ 為速度場； R_A 為物種 A 的反應項(本研究不考慮，設定為 0)； $\mathbf{J}$ 為濃度的擴散通量向量(Diffusion Flux Vector)，其方程式表示為：

$$\mathbf{J} = -D_{AB} \nabla C_A \quad (2-5b)$$

其中 D_{AB} 為物種 A 在物種 B 內的擴散係數(本文設定數值為 $10^{-14}[\text{m}^2/\text{s}]$ ，以觀察流道因對流機制所促使的混合效應)。

因本研究為穩態質傳方程式，物種 A 的莫耳濃度對時間之導數 $\frac{\partial C_A}{\partial t}$ 為 0。綜合上述方程式可改為：

$$-D_{AB} \nabla^2 C_A + \mathbf{u} \cdot \nabla C_A = 0, \quad (2-6)$$

其中 $-D_{AB} \nabla^2 C_A$ 為擴散項，表示由於分子擴散引起的物質 A 之傳輸。它由濃度梯度所驅動，描述物質從高濃度區域向低濃度區域擴散的過程；而 $\mathbf{u} \cdot \nabla C_A$ 為對流項，此項考慮到由於流體的整體流動而引起的物質 A 之傳輸。它代表給定體積下，物質進出的淨流量。(2-6)式即為本研究中以稀薄質傳法來計算不同流體間混合之統

御方程式，由一擴散項與一對流項所組成，如在已知速度場 $\mathbf{u}$ 的情況下，則能求解(2-6)式算出 C_A ，計算流道內物質的濃度場，瞭解流體的混合現象。



2.3.3 混合指標

利用上節所述的穩態質傳方程式，可計算混合器內的混合分布。在本文的計算中，將給定的注入濃度設定為 $C_A = 10$ (入口處左半圓區域)和 $C_B = 0$ (入口處右半圓區域)，且因計算時設定物種 A 和物種 B 所流入之流量相同，如混合器能將兩物種完全混合並達穩態，則在混合器出口處之濃度 $C = C_\infty = 5$ (在此 $C = C_A$)。要估算混合器某一軸向截面的混合程度，可將截面中所有網格點的濃度取標準差來計算混合指標(Mixing Index)，其定義為：

$$MI = 1 - \frac{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (C_i - C_\infty)^2}{N}}}{C_\infty}, \quad (2-7)$$

其中 N 是某一軸向截面中，網格點的數量； C_i 為某一軸向截面中，第 i 點網格的濃度； C_∞ 為混合器完全混合之濃度，其數值為 5。

在已知濃度場的情況下，則能求解(2-7)式算出混合指標 MI ，來評估流體混合之效果。當 $MI = 1$ 時表示完全混合，而 $MI = 0$ 時表示沒有混合。

2.4 初始條件與邊界條件

在計算流體力學的研究中，準確的初始條件和邊界條件是獲得可靠結果的關鍵。初始條件描述了系統在計算開始時的狀態，而邊界條件定義了系統邊界上的物理性質和行為。在稀薄質傳法的穩態計算中，由於系統已達穩定狀態，無需設定初始條件。本文將詳細介紹針對所研究流體系統設定的邊界條件，以確保模擬結果的準確性。

令 u 、 v 及 w 為速度 $\mathbf{u}$ 沿著 x 、 y 及 z 軸方向上的速度分量，其中 z 軸與流道的中心軸重合，則流道表面及 SMX 混合器內部橫桿表面的邊界條件為：



$$u = v = w = \frac{\partial c}{\partial n} = 0, \quad (2-8)$$

其中 n 為該處邊界的法線方向。

流道入口處之左半圓面的邊界條件為：

$$w = U_0 \text{ (specified value)}, \quad u = v = 0, \quad (2-9a)$$

$$c = C_0. \quad (2-9b)$$

流道入口處之右半圓面的邊界條件為：

$$w = U_0 \text{ (specified value)}, \quad u = v = 0, \quad (2-10a)$$

$$c = 0. \quad (2-10b)$$

其中(2-9a)式中的 U_0 值也可用與(2-10a)式中不同的值。本文參考 Lim et al.[19]文獻中所設定之總流量，並推導出 U_0 之數值，即為 10.6mm/s。

出口面的邊界條件為：

$$p = 0, \quad n \cdot (-D_{AB} \nabla C_A) = 0, \quad (2-11)$$

其中 p 為壓力。

COMSOL Multiphysics 計算軟體的邊界條件設定見圖 2.4，分別為流道入口處的左半圓面與右半圓面，以及混合器濃度分布之示意圖。

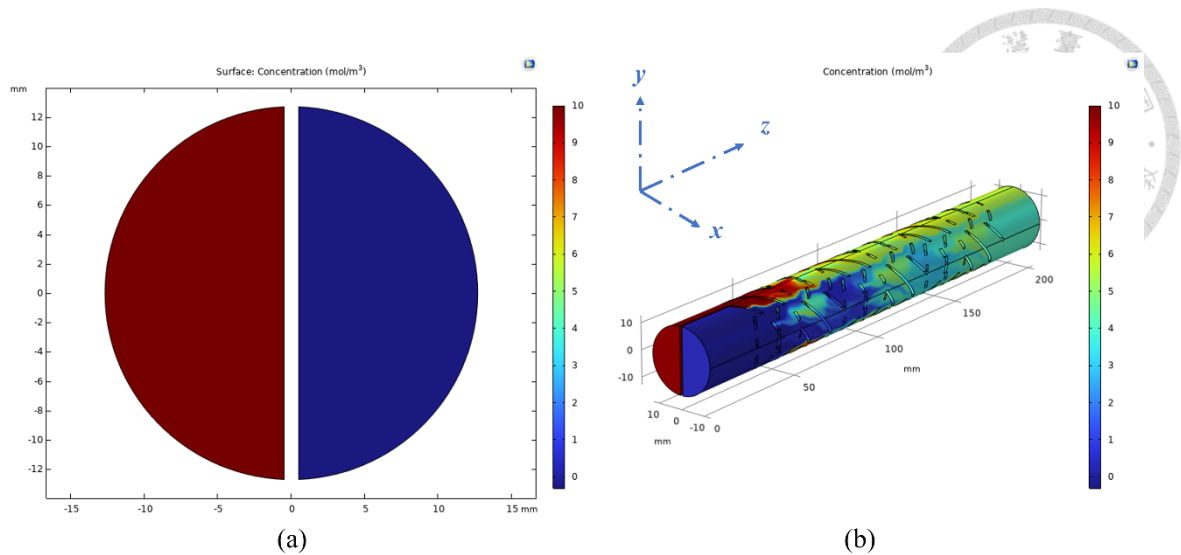


圖 2.4 軟體邊界條件之設定。(a)流道入口處，左半圓面設定 $c = C_0$ ，右半圓面設定 $c = 0$ 。(b)混合器於穩態時，利用稀薄質傳法所計算之濃度分布。

2.5 COMSOL Multiphysics 計算軟體

COMSOL Multiphysics 是一款利用有限元素法進行數值模擬的電腦輔助工程軟體，用於建造所需之模型以解決各種科學和工程問題。此軟體提供整合的開發環境，具有「模型建造器」讓使用者可全面瞭解物理模型並運用軟體的所有功能。COMSOL Multiphysics 讓使用者可將單一物理類別的模型延伸為耦合多重物理量的多物理模型，並且可以同時進行計算。通過定義相關的物理量(如材料性質、幾何結構、邊界條件、負載和通量...等)，使用者不需定義基礎方程式來構建模型，因此，現今已成為許多教育研究及業界所常用之軟體[28][29][30]。

COMSOL Multiphysics 數值計算的步驟(見圖 2.5)如下：

- I. 選定計算的維度，本研究採用 3D 立體空間進行模擬。
- II. 選取求解的物理場，本研究採用流體、化學物種輸送進行模擬。
- III. 繪製模擬的幾何結構，本研究採用軟體內建的模型進行繪製。
- IV. 設定物理場的相關假設、物理參數及變數。
- V. 選取模擬的材料並設定所需的材料參數。
- VI. 設定模擬的初始條件及邊界條件。

VII. 建立網格。COMSOL 內建多種不同形狀的網格可供選擇，例如不規則三角形網格或四面體網格等。網格形狀應根據幾何的維度及特性來進行選擇。

VIII. 進行計算與後處理。COMSOL 會根據預設的物理參數和邊界條件解決模型的數學方程式。當模擬結果符合預期成果時，即進入後處理階段。後處理之目的在於進一步分析及展示模擬結果，不論是定性分析抑或定量評估都是研究不可或缺的一部分。

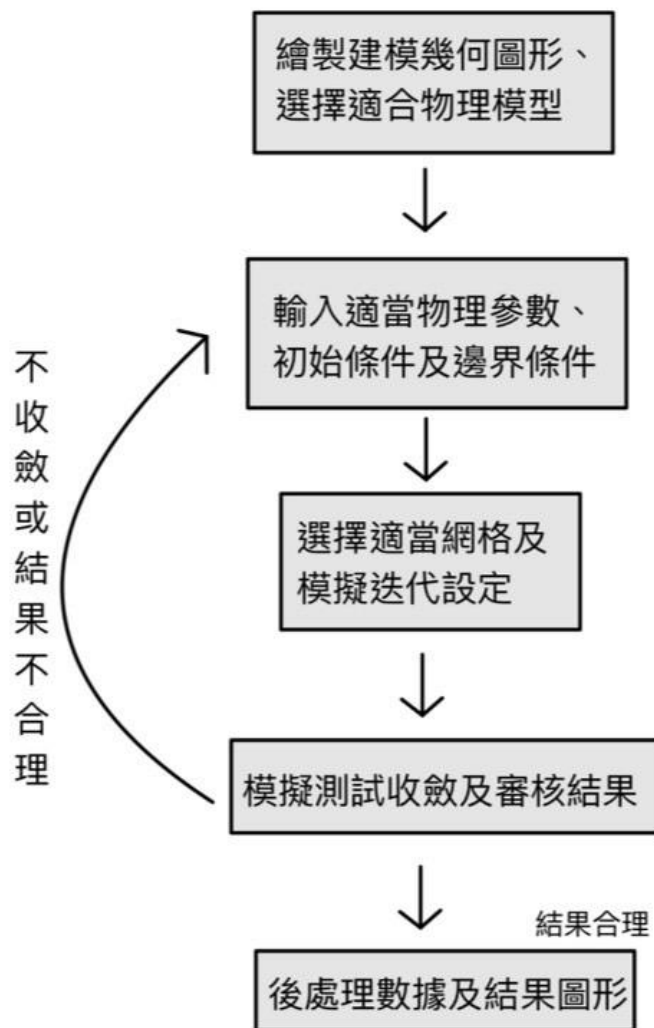


圖 2.5 COMSOL Multiphysics 進行數值計算之步驟流程。

第三章 結果與討論



本章將利用 COMSOL Multiphysics 進行數值模擬，探討混合器內部流場和濃度場的分析結果。首先，本章會介紹本研究在計算時，所採用的網格尺寸和設計時的考量。網格是將連續流場離散化成電腦可處理之問題的基礎，在計算流體力學中相當重要，會影響到模擬結果的準確性、計算的穩定性和時間效率。根據混合流道的結構、流體的選用和求解的物理量，需要選擇合適的網格以進行計算。接著，討論 SMX 靜態混合器的幾何結構如何影響流體的混合效果，本研究透過計算濃度分布、混合指標及混合器內的整體壓力降，瞭解 SMX 靜態混合器的最佳幾何結構為何者。隨後，透過設計出的幾何結構，分析不同流體於 SMX 混合器內混合的差異，以探討不同黏度流體對混合效果的影響。透過這些模擬結果與計算相關的混合效率，能深入理解 SMX 靜態混合器在不同條件下的混合表現。當 SMX 靜態混合器討論結束後，將研究 SMX+SCT 混合器的混合情形。探討 SCT 元件與 SMX 元件結合時，調整不同突縮比(Contraction Ratio)與不同 SCT 元件長度，造成的混合差異和壓力降之變化，以瞭解突縮圓管 SCT 能否提高流道內的混合情況，或是能與 SMX 靜態混合器相比擬，這將為混合器設計提供更深入的見解。

討論完混合器的相關設計後，吾人將研究具有彈性效應的非牛頓流體，即為黏彈流體，其是否在混合過程中更具優勢。與牛頓流體不同的是，其流體黏度隨著剪切率和應力的改變而變化，具有更複雜的流動行為。本文透過模擬兩種不同的非牛頓流體模型(其中一種的組成率為較複雜的黏彈模型)，並與實驗結果相互對照，瞭解何種模型在執行計算時，能與實驗的混合情形較為相似。透過第一法向應力差(First Normal Stress Differences)和第二法向應力差(Second Normal Stress Differences)的計算，探討造成兩種模型差異的原因。本章的最後，將分析不同濃度的黏彈流體，瞭解不同程度的彈性效應，對於混合情形以及壓力降之影響。模擬結果對於流體在流道中的行為以及混合過程的控制具有重要意義，可為流道混合提供新的見解，並促進技術的創新和發展。



3.1 網格設定

本研究旨在模擬 SMX 靜態混合器和突縮流道內的三維流場和濃度場分布。除了考慮 SMX 靜態混合器內部葉片的詳細幾何結構與尺寸大小外(參照 2.1.1 節), 吾人也選用黏彈流體模型進行計算。相對於牛頓流體, 黏彈流體的統御方程式更為複雜。因此, 在進行數值分析時, 本研究特別重視所選擇的網格尺寸。與 COMSOL 軟體內建的 9 種網格模組相比, 吾人選用「使用者控制的網格」, 以滿足模擬的特定要求。使用四面體元素對計算區域進行空間離散化, 並設定了以下參數: 最大元素尺寸(Maximum element size)為 1mm、最小元素尺寸(Minimum element size)為 0.35mm、最大元素成長率(Maximum element growth rate)為 1.5、曲率因子(Curvature factor)為 0.6, 狹區解析度(Resolution of narrow regions)為 0.5。這樣的網格尺寸既能確保達到所需的混合效果, 又能避免在模擬黏彈性流體時因網格過細而導致流體的彈性不穩定, 從而防止計算無法收斂和無限發散的問題。除此之外, 還能有效控制時間成本, 避免因過細的網格而導致計算效率低下的情況發生。SMX 靜態混合器和突縮流道計算所需之網格尺寸如圖 3.1 和圖 3.2 所示。

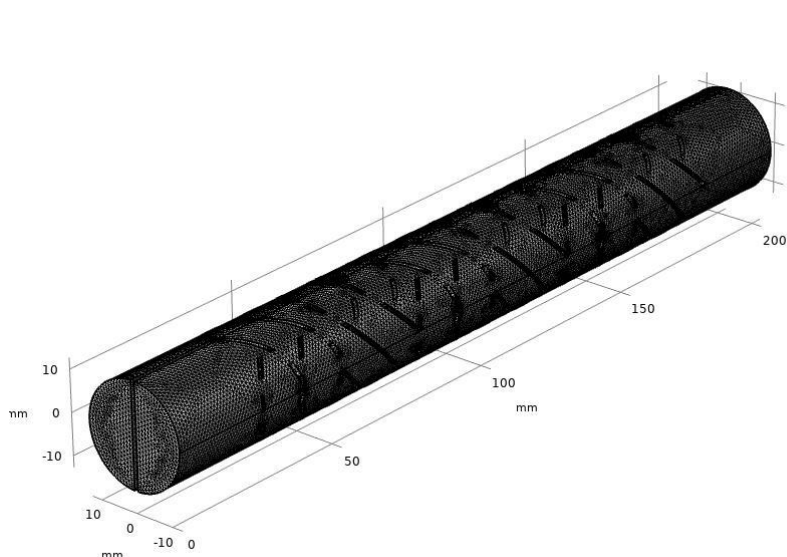


圖 3.1 SMX 靜態混合器於 COMSOL 所使用之網格尺寸示意圖。採用「使用者控制的網格」, 共 1,239,374 個有限元素。

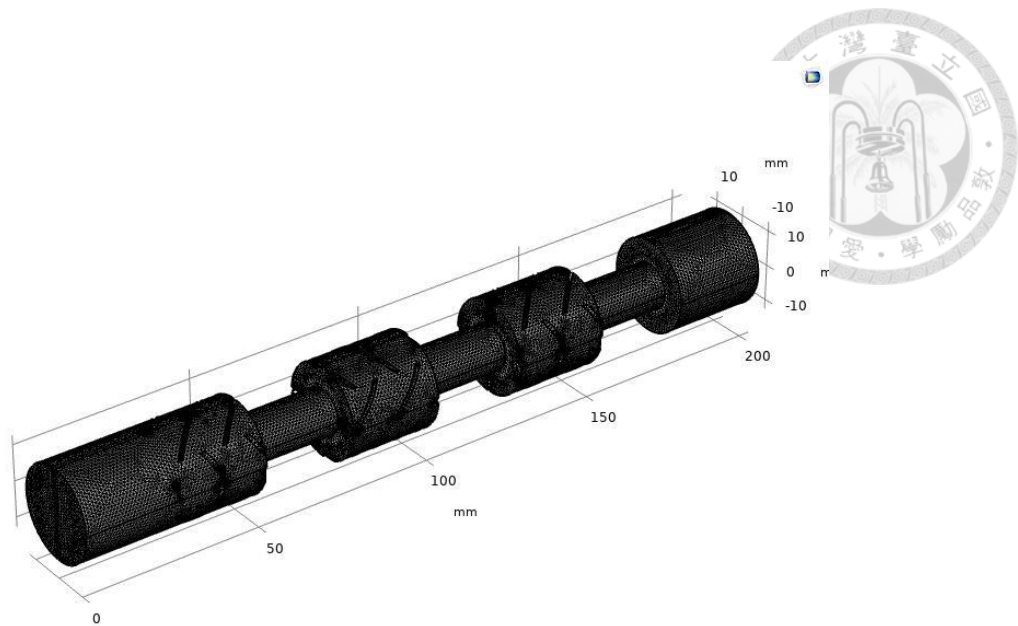


圖 3.2 SMX+SCT 混合器於 COMSOL 所使用之網格尺寸示意圖。採用「使用者控制的網格」，共 884,772 個有限元素。

為瞭解「使用者控制網格」與 COMSOL 軟體內建網格之差異，本文額外測試 2 種不同的內建模擬網格，分別為「細化(Fine)網格」與「正常(Normal)網格」。其網格數量分別為千萬級與百萬級，2 種模擬網格尺寸分別如圖 3.3 與圖 3.4 所示。吾人使用稀薄質傳法，計算在不同模擬網格下，SMX 靜態混合器內的濃度分布數據，並進行後處理以作定量的分析。如同本文 2.3.2 節所述，透過混合指標來量化本研究模擬的混合程度，結果如圖 3.5 所示。由此圖可看出混合指標隨著 z 的增加而逐漸上升，顯示混合效果隨著流動距離的增加而逐漸變好，於最後一個截面，對照 3 種不同的內建模擬網格，其混合指標 MI 分別為 0.93, 0.93, 0.92，計算所花費時間分別為 307min、91min、17min。根據此結果，選擇「使用者控制網格」作為後續模擬的網格尺寸，因其所耗費的計算時間為最短，同時能有效防止在模擬黏彈性流體時產生不穩定現象，避免計算無法收斂或無限發散的問題。

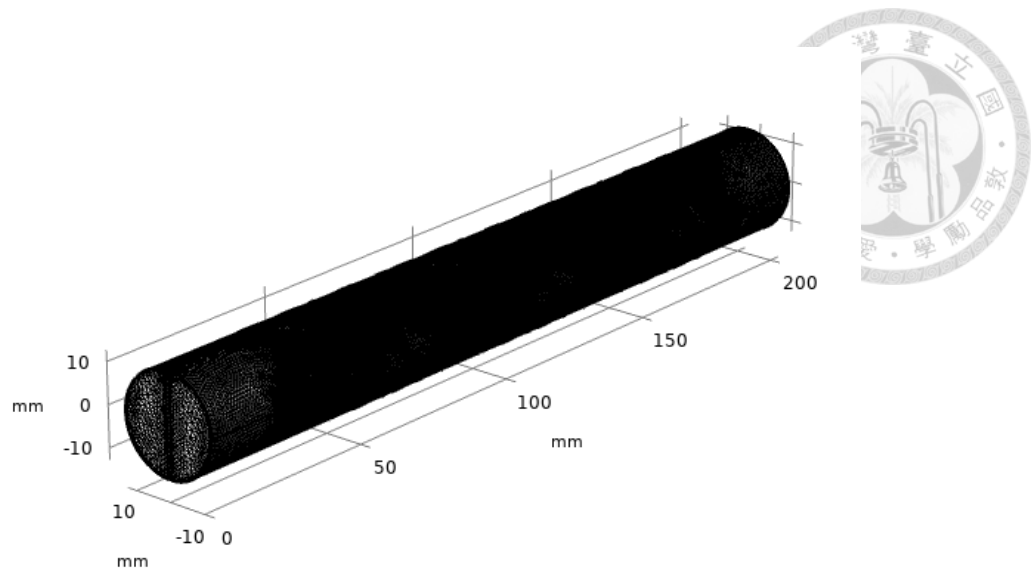


圖 3.3 SMX 靜態混合器於 COMSOL 所使用之網格尺寸示意圖。採用「細化(Fine)網格」，共 23,927,146 個有限元素。

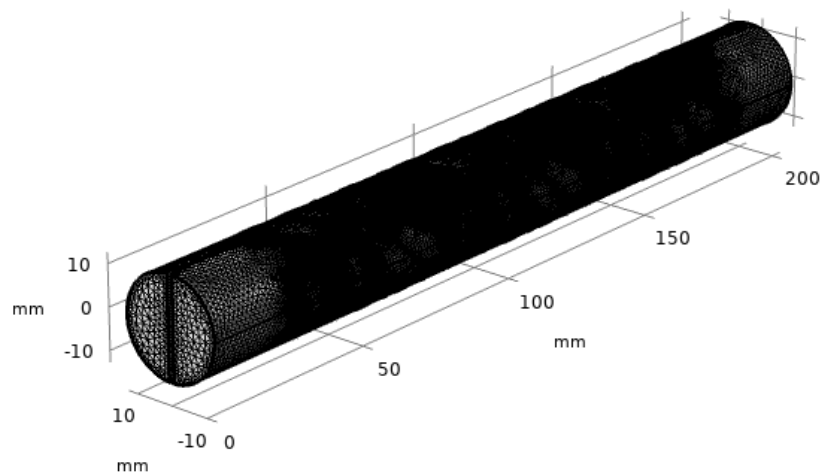


圖 3.4 SMX 靜態混合器於 COMSOL 所使用之網格尺寸示意圖。採用「正常(Normal)網格」，共 8,034,806 個有限元素。

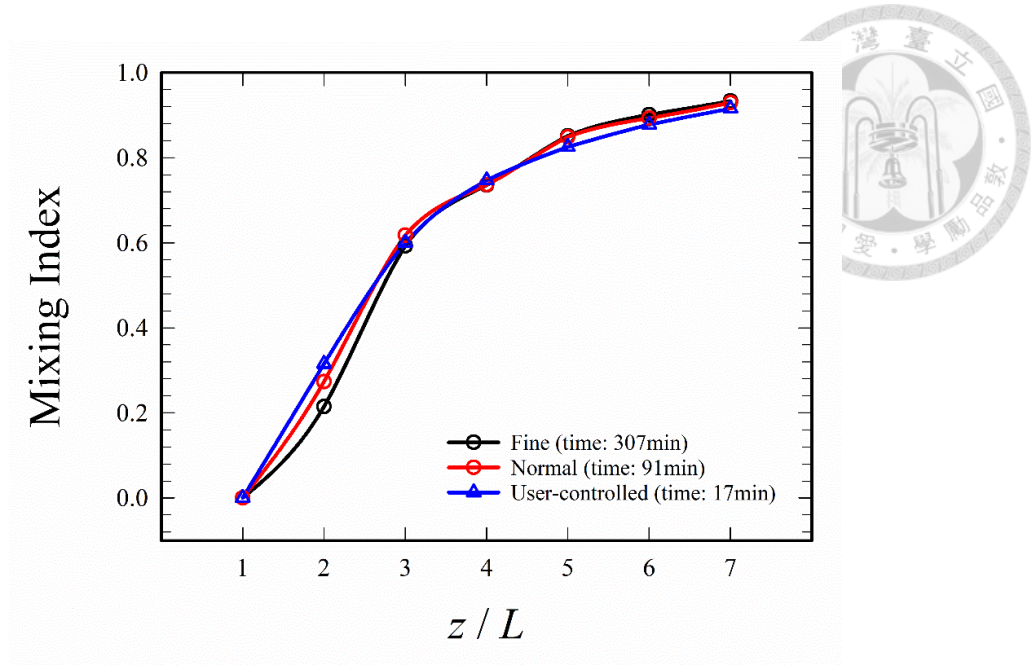


圖 3.5 3 種不同內建網格之混合指標(在各個混合器元件出口截面處)的影響。

3.2 SMX 幾何結構對於混合之影響

本節旨在調整 SMX 靜態混合器的幾何結構參數，探討這些參數對於混合效果的影響，並透過混合指標以及壓力降的計算，尋求 SMX 靜態混合器的最佳化幾何結構。根據 Singh et al.[18]的描述，SMX 幾何結構的設計參數主要包括三個，分別為 N_x ， N_p 和 N_θ (其定義可參照本文 1.3 節)，該研究透過定性和定量分析，確定某些 N_x 和 N_p 的組合可達到最佳化混合，並提出了 SMX 靜態混合器的通用設計原則，該設計可以避免界面拉伸不足或過度拉伸，從而改善流體混合過程。其方程式表示為：

$$N_p = \frac{2}{3}N_x - 1. \quad (3-1)$$

此方程式能在已知 N_x 的情況下，瞭解 N_p 的最佳數值為何。

本研究對於 N_p 的數值也將作詳細的分析，因此將 Singh et al.[18]所提出的方程式改寫如下：



$$N_x = \frac{3}{2}(N_p + 1). \quad (3-2)$$

此方程式能在已知 N_p 的情況下，瞭解 N_x 的最佳數值為何。

吾人將分別討論不同 N_x 、不同 N_p 和不同 N_θ 對混合效果的影響，確認所選之非牛頓流體是否符合(3-1)及(3-2)式的 SMX 靜態混合器設計公式，並定量計算不同設計參數的混合指標，瞭解其混合效率。於本節最後，吾人將與文獻 Lim et al.[19] 的實驗結果進行比較，驗證本研究對於流道分析的正確性。關於 SMX 靜態混合器的原始結構，吾人將採用文獻 Lim et al.[19]中所使用的設計作為基礎($N_x = 8$ 、 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$)，調整不同 N_x 、不同 N_p 和不同 N_θ ，並選定不同軸向位置的截面瞭解流體的混合情況。本研究將繪製 SMX 靜態混合器不同 L 之截面，其中 L 為單一混合元件的長度，具體示意位置如圖 3.6 所示。在流體性質的選擇上，參考表 2.1 中的相關資訊，採用文獻 Lim et al.[19]中所使用的非牛頓流體，即 1% CMC 溶液。

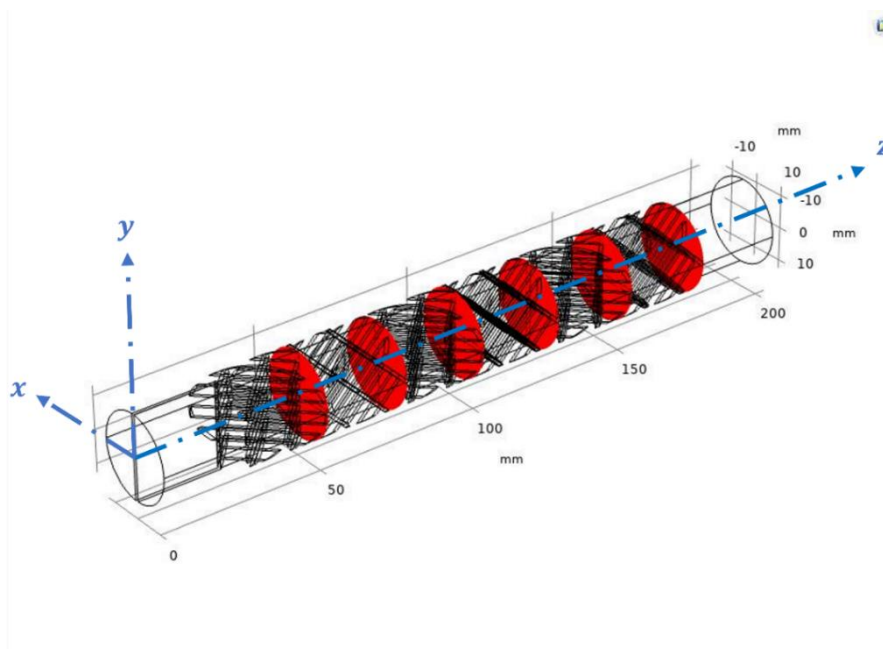


圖 3.6 SMX 靜態混合器之截面示意圖，紅色部份顯示 6 個檢視截面。截面所在位置分別為： $2L$, $3L$, $4L$, $5L$, $6L$ 和 $7L$ ，其中 L 為單一混合元件的長度。



3.2.1 不同 N_x 之參數設計

在本小節中，吾人使用稀薄質傳法對濃度分布進行數值分析。在固定 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 的情況下，調整 N_x 來觀察其對混合效果的影響，並繪製出 $1L \sim 7L$ 的二維截面。本文共計算 5 個不同 N_x 的數值，即對 $N_x = 4, 6, 8, 10$ 和 12 進行數值分析，結果如圖 3.7 所示。觀察可知，在固定 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 時，原先所採用的 SMX 靜態混合器($N_x = 8$)，其混合效果並非最佳設計。將 N_x 值調高後，混合狀況並未改善，反而有所惡化。因此，要達到最佳化的設計，依照圖中的濃度分佈($z = 7L$ 截面處，濃度值愈接近 5、即愈接近綠色者)， $N_x = 6$ ，能將 SMX 混合器流道的混合狀況作最有效的提升。

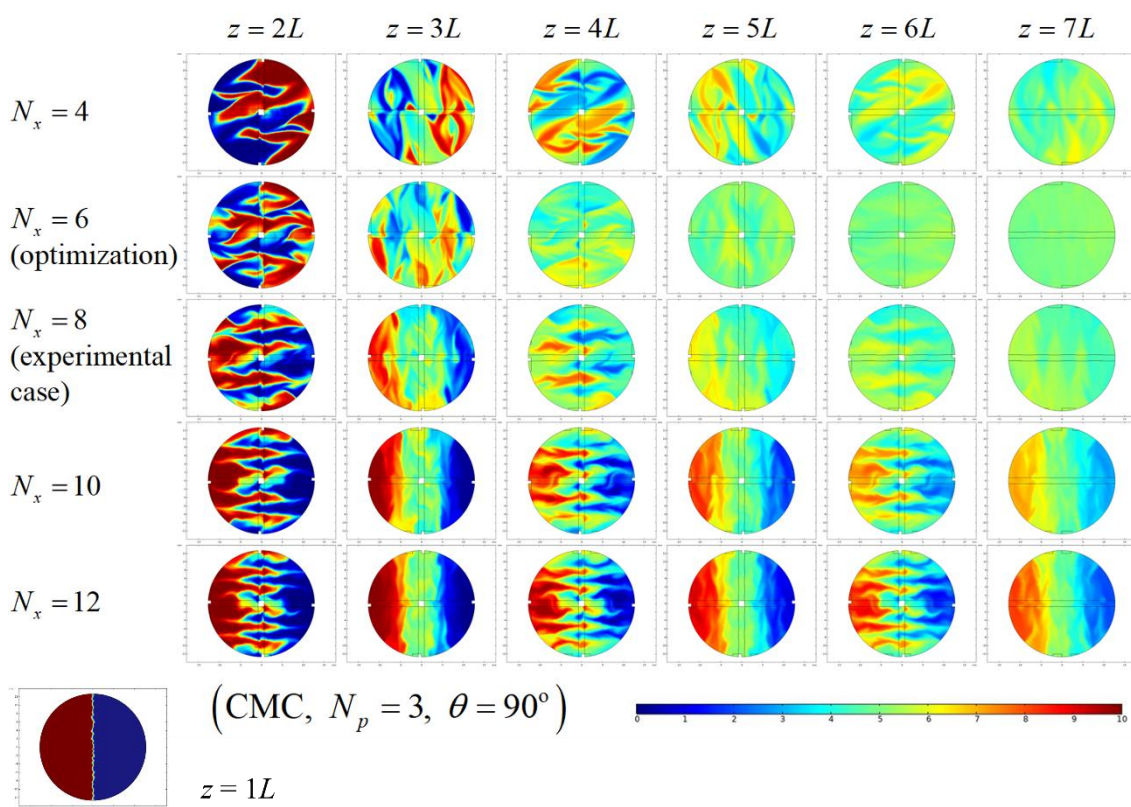


圖 3.7 N_x 對固定 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 的混合器之濃度分布(在各個混合器元件出口截面處)的影響。

為了增加數值分析的準確度，本研究對混合器內的濃度分布數據，進行後處理以作定量分析。如同本文 2.3.2 節所述，透過混合指標來量化本研究模擬的混合程

度，結果如圖 3.8 所示。由此圖可看出混合指標隨著 z 的增加而逐漸上升，顯示混合效果隨著流動距離的增加而逐漸變好，於最後一個截面，對照 $N_x = 4, 6, 8, 10$ 及 12，其混合指標 MI 分別為 0.89, 0.98, 0.92, 0.74, 0.62。根據此結果，選擇 $N_x = 6$ 能夠在固定 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 的條件下提供最佳的混合效果，其混合指標為 0.92。這除了與圖 3.7 觀察到的混合結果一致外，也在 Singh et al.[18]所提出的通用設計原則下成立，當 $N_p = 3$ 時，方程式(3-2)所計算出的 $N_x = 6$ 。因此將 N_x 的數值從 8 改為 6 能獲得較高的混合指標，從而提高混合效率。

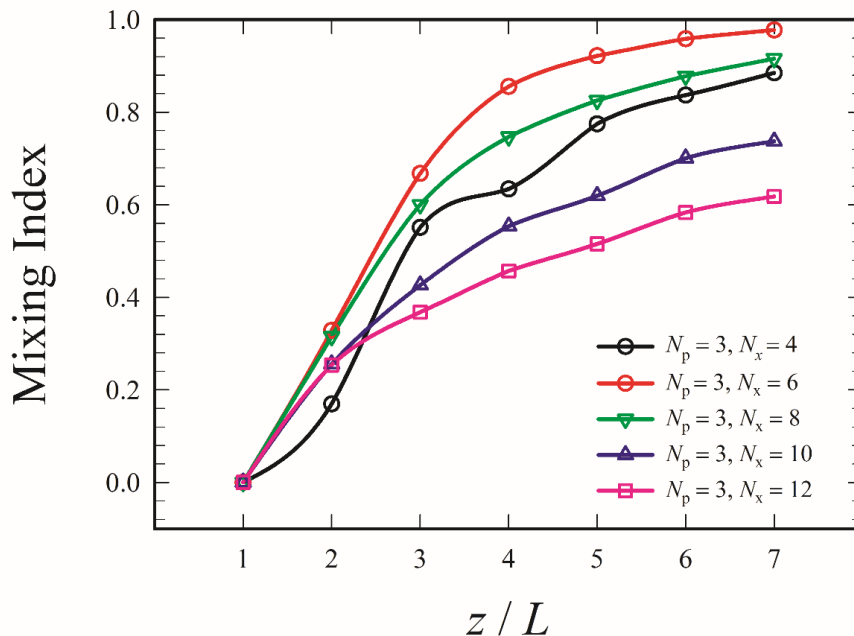


圖 3.8 N_x 對固定 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 的混合器之混合指標(在各個混合器元件出口截面處)的影響。

3.2.2 不同 N_p 之參數設計

接著，吾人在固定 $N_x = 8$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 的情況下，使用稀薄質傳法對濃度分布進行數值分析。調整 N_p 來觀察其對混合效果的影響，並繪製出 $1L \sim 7L$ 的二維截面。本文共計算 4 個不同 N_p 的數值，即對 $N_p = 1, 3, 5, 7$ 進行數值分析，結果如圖 3.9 所示。觀察可知，在固定 $N_x = 8$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 時，原先所採用的 SMX 靜態混合

器($N_p = 3$)，其混合效果並非最佳化設計。將 N_p 調低後，混合狀況並未改善，反而有所惡化。因此，要達到最佳化的設計，按圖 3.9 的結果，應選定 $N_p = 5$ ，這能將 SMX 混合器的混合狀況作最有效的提升。

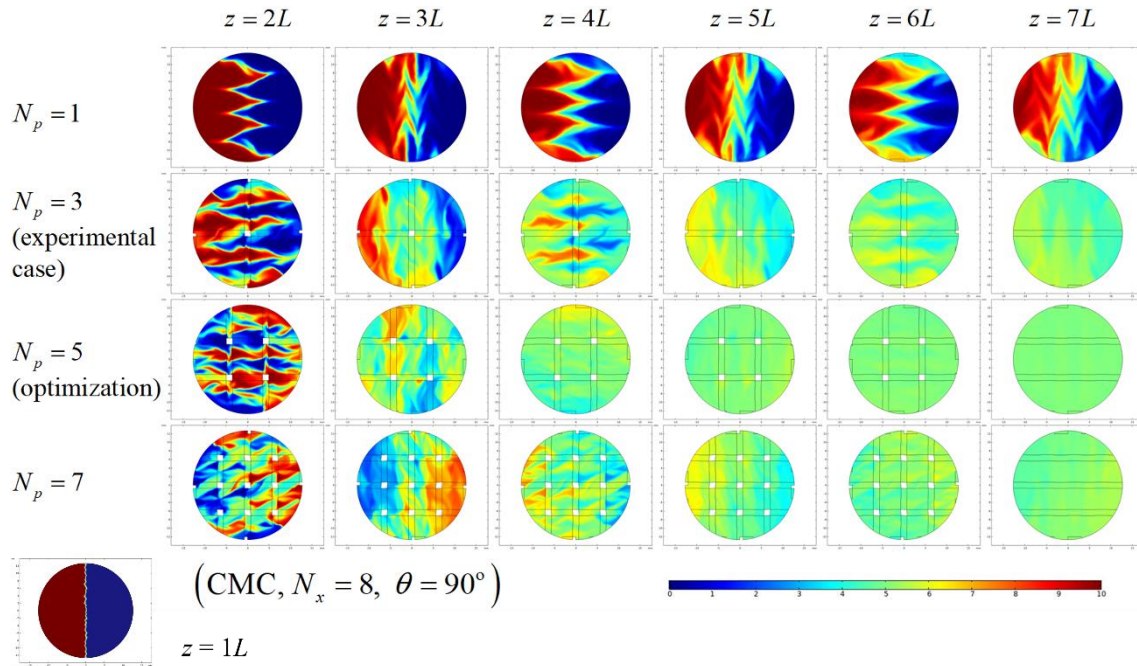


圖 3.9 N_p 對固定 $N_x = 8$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 的混合器之濃度分布(在各個混合器元件出口截面處)的影響。

為了增加數值分析的準確度，本研究對混合器內的濃度分布數據，進行後處理以做定量分析。如同本文 2.3.2 節所述，透過混合指標來量化本研究模擬的混合程度，結果如圖 3.10 所示。由此圖可看出混合指標隨著 z 的增加而逐漸上升，顯示混合效果隨著流動距離的增加而逐漸變好，於最後一個截面，對照 $N_p = 1, 3, 5$ 及 7 ，其混合指標 MI 分別為 $0.37, 0.92, 0.99$ 及 0.95 。根據此定量分析的結果，選擇 $N_p = 5$ 能夠在固定 $N_x = 8$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 的條件下提供最佳的混合效果，其混合指標為 0.99 。這除了與圖 3.9 觀察到的混合結果一致外，也在 Singh et al.[18]所提出的通用設計原則下成立，當 $N_x = 8$ 時，方程式(3-1)所計算出的 $N_p = 4.33$ 。因此將 N_p 的數值從 3 改為 5 能獲得較高的混合指標，從而提高混合效率。

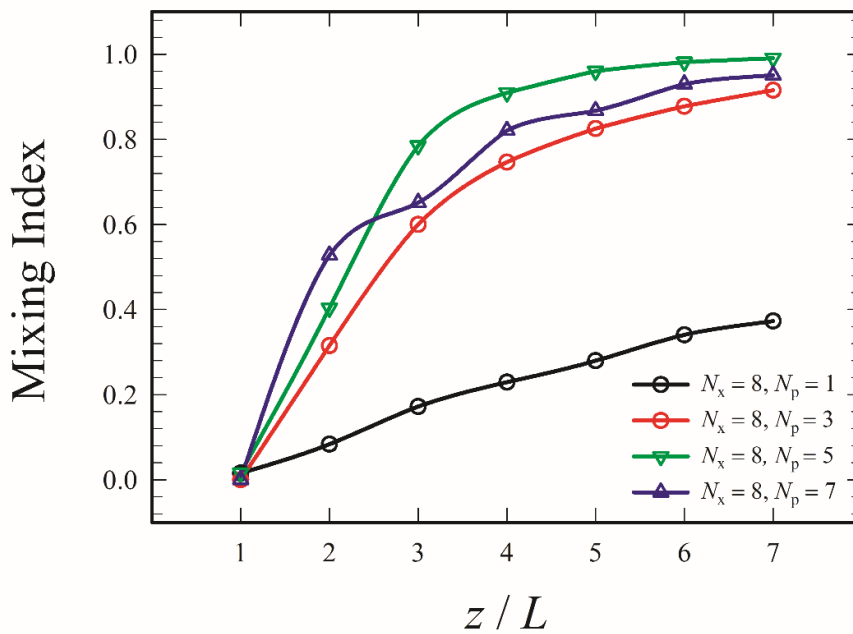


圖 3.10 N_p 對固定 $N_x = 8$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 的混合器之混合指標(在各個混合器元件出口截面處)的影響。

3.2.3 不同 N_θ 之參數設計

接下來，吾人在固定 $N_x = 8$ 和 $N_p = 3$ 的情況下，使用稀薄質傳法對濃度分布進行數值分析。調整 N_θ 來觀察其對混合效果的影響，並繪製出 $1L \sim 7L$ 的二維截面。本文共計算 2 個不同 N_θ 的數值，對 $N_\theta = 90^\circ$ 和 120° 進行數值分析，結果如圖 3.11 所示。觀察可知，在固定 $N_x = 8$ 和 $N_p = 3$ 時，原先所採用的 SMX 靜態混合器，相鄰兩葉片之間的角度為 90° ，即 $N_\theta = 90^\circ$ 時所達到的混合情況為較佳。這證明不需要額外調整參數，即可將 SMX 混合器流道的混合狀況達到最有效地提升。為了增加數值分析的準確度，本研究對混合器內的濃度分布數據進行後處理，以做定量分析。

如同本文 2.3.2 節所述，透過混合指標來量化本研究模擬的混合程度，結果如圖 3.12 所示。由此圖可看出混合指標隨著 z 的增加而逐漸上升，顯示混合效果隨著流動距離的增加而逐漸變好，於最後一個截面，其混合指標 MI 分別為 0.92 ($N_\theta = 90^\circ$) 以及 0.74 ($N_\theta = 120^\circ$)。根據定量分析的結果，選擇 $N_\theta = 90^\circ$ 能夠在固定 $N_x =$

8 和 $N_p = 3$ 的條件下提供較佳的混合效果，其混合指標為 0.92，與圖 3.11 觀察到的混合結果一致。

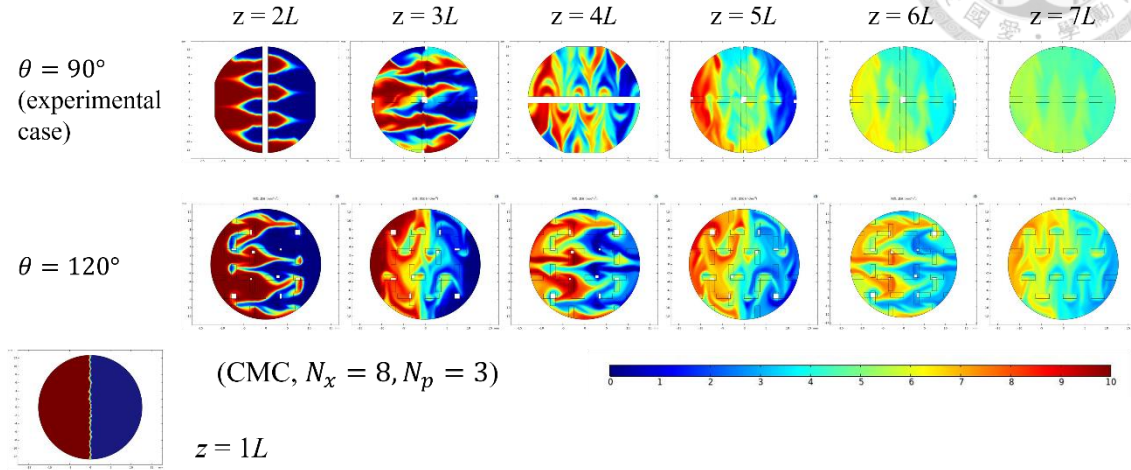


圖 3.11 N_θ 對固定 $N_x = 8$ 和 $N_p = 3$ 的混合器之濃度分布(在各個混合器元件出口截面處)的影響。

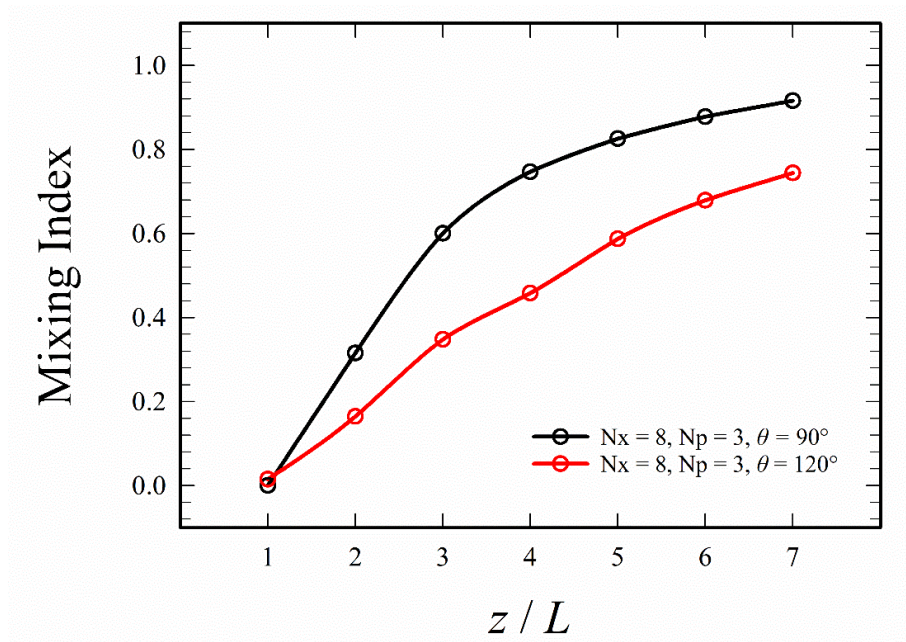


圖 3.12 N_θ 對固定 $N_x = 8$ 和 $N_p = 3$ 的混合器之混合指標(在各個混合器元件出口截面處)的影響。



3.2.4 最佳化設計與實驗結果比較

本小節將統整 3.2.1 小節與 3.2.2 小節得出的 SMX 靜態混合器最佳化設計，與文獻 Lim et al.[19]的實驗結果進行比較。根據 Singh et al.[18]的通用設計原則，吾人推導出兩組 N_x 和 N_p 的最佳化參數，並設定 $N_\theta = 90^\circ$ 。這兩組參數分別為 $N_x = 6$ 和 $N_p = 3$ 以及 $N_x = 8$ 和 $N_p = 4.33$ (因橫桿數量需為整數，本研究將計算 $N_p = 4$ 和 $N_p = 5$ 來探討計算結果)。將這些不同 SMX 幾何結構的混合情形與 Lim et al.[19]所採用之 SMX 幾何結構($N_x = 8$, $N_p = 3$)的混合情形進行比較，其不同截面的混合結果與相對應的混合指標之計算結果分別如圖 3.13 及圖 3.14 所示。觀察可知混合情況與文獻的實驗結果一致，這也間接證實本研究對後續流道情況分析的正確性，其中包括 $1.5L$ 到 $7L$ 的混合情況。由圖 3.13 和圖 3.14 也可瞭解，採用(3-1)及(3-2)式的通用設計原則所得到的最佳化的參數，顯示出較好的混合結果，混合指標介於 0.98~0.99 間，相較之下，Lim et al.[19]所採用的商用標準 SMX 混合器(圖中以 experimental case 標示)，其幾何結構的混合指標計算之數值為 0.92。

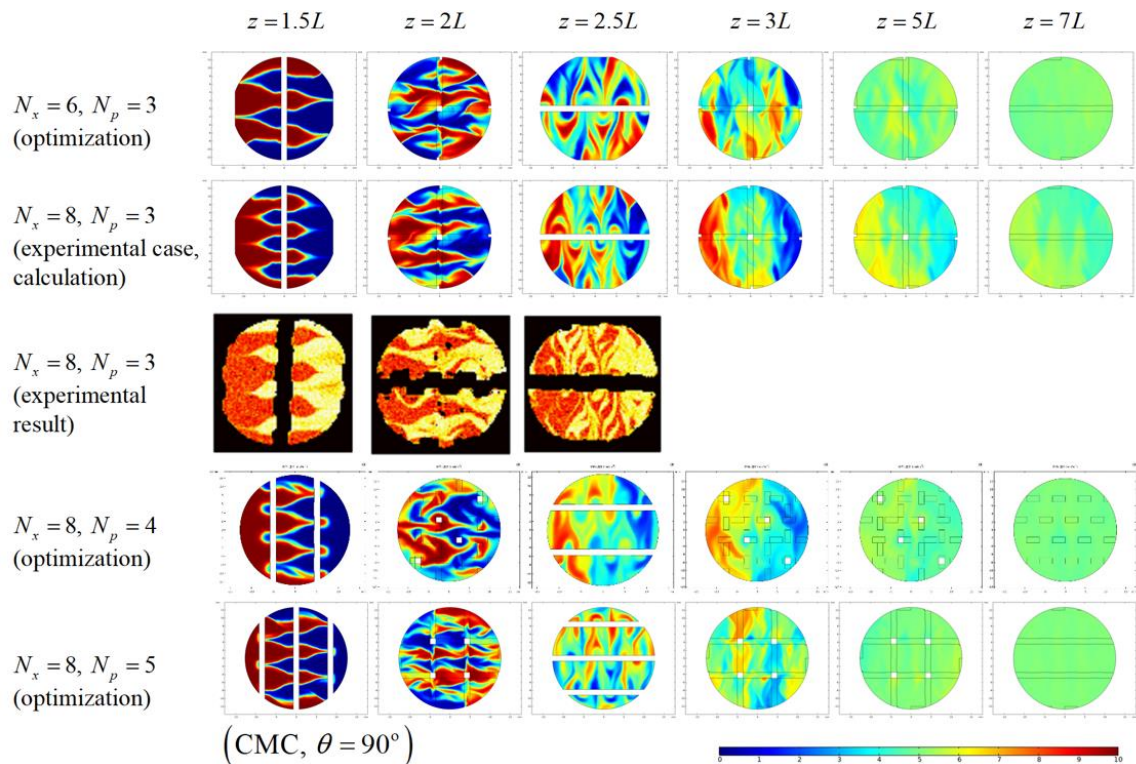


圖 3.13 使用從(3-1)與(3-2)式推導出的最佳化參數，將實驗結果之濃度分布與本文數值模擬結果進行比較。

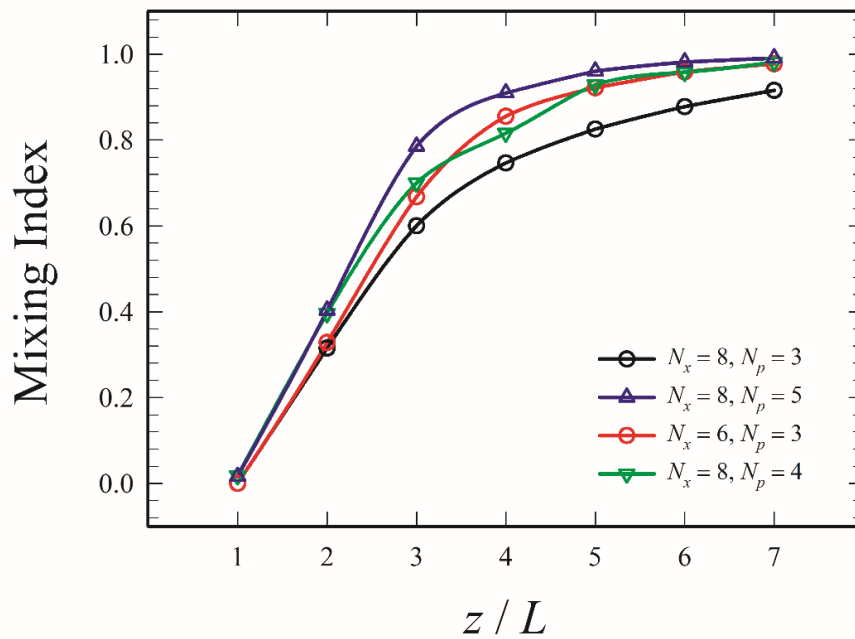
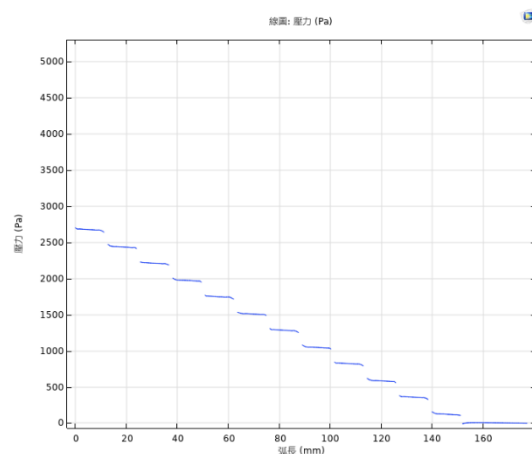
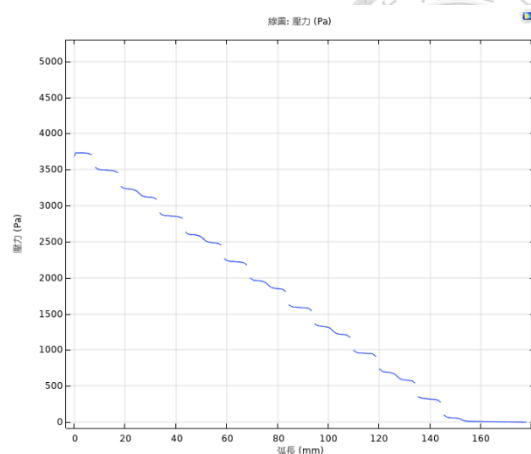


圖 3.14 具有最佳化參數之混合器的混合指標，與使用商用標準 SMX 混合器元件 ($N_x = 8$ 和 $N_p = 3$) 的結果比較。

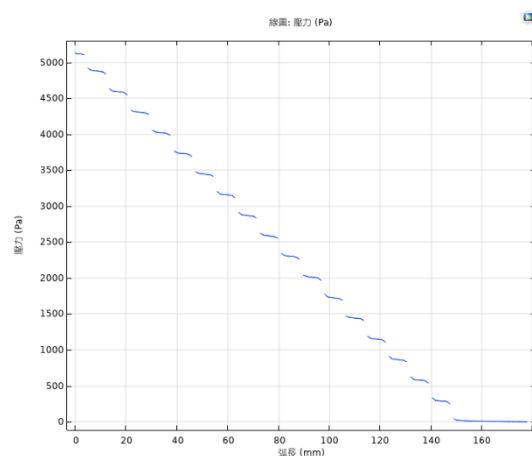
探討完 SMX 混合器不同幾何結構的混合情形後，本研究針對圖 3.13 及圖 3.14 中的四種不同的參數設計，探討其沿著混合器軸向方向的壓力變化，瞭解不同幾何結構的壓力降，總結出對於 SMX 靜態混合器而言，幾何結構的最佳參數選擇為何者。圖 3.15 為圖 3.13 這四種不同幾何結構的壓力變化圖，圖 3.15 (a) 為 Lim et al.[19] 所採用的商用標準 SMX 混合器，壓力降約為 2700Pa；圖 3.15 (b) 以及圖 3.15 (c) 為固定 $N_x = 8$ 的情況下， $N_p = 4$ 和 $N_p = 5$ 的參數設計，壓力降分別為 3800Pa 和 5000Pa；圖 3.15 (d) 為固定 $N_p = 3$ 的情況下， $N_x = 6$ 的參數設計，壓力降為 2200Pa。綜合考量混合指標以及壓力降之數值，可推斷出對於 SMX 靜態混合器， $N_x = 6$ 、 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 的參數設計為最佳選擇，因其具有較高的混合指標之數值和最小的壓力降。值得注意的是，圖 3.15 顯示出的壓力降與混合器中的橫桿數量($N_x * N_p$)成正比。圖 3.15 (a)、(b)、(c) 及 (d) 分別對應到的 $N_x * N_p$ 為 24、32、40 和 18，其壓力降分別為 2700Pa、3800Pa、5000 Pa 和 2200Pa。



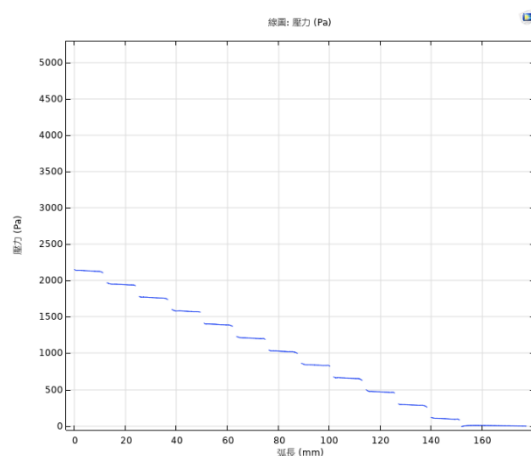
(a)



(b)



(c)



(d)

圖 3.15 不同幾何結構參數，各個 SMX 靜態混合器之壓力降。(a)商業標準 SMX 混合器之結構， $N_x = 8$ 、 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 。(b)~(d)為根據最佳化參數所模擬之 SMX 混合器之結構，(b) $N_x = 8$ 、 $N_p = 4$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ (c) $N_x = 8$ 、 $N_p = 5$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ (d) $N_x = 6$ 、 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 。

3.3 不同流體對於 SMX 混合器之影響

本節將選用不同的流體，透過改變其黏度，觀察在三種不同 SMX 幾何結構的情況下，流道內混合情形是否會與上述 CMC 溶液者定性相似。此三種 SMX 混合器包括前述兩項最佳化設計的混合器($N_x = 6$ 、 $N_p = 3$ 、 $N_\theta = 90^\circ$ 和 $N_x = 8$ 、 $N_p = 5$ 、 $N_\theta = 90^\circ$)及 Lim et al.[19]實驗中所採用的標準商用 SMX 混合器($N_x = 8$ 、 $N_p =$

3、 $N_\theta = 90^\circ$)。本文所研究的流體其性質如表 3.1 所示。非牛頓流體選擇的為 Lim et al.[19]以及 Mihailova et al.[20]實驗時所選用之流體，分別為 CMC 溶液及關華豆膠溶液(Guar Gum solution)，牛頓流體選擇的為甘油(Glycerol)、橄欖油(Olive oil)及水(Water)。

表 3.1 計算所選用之不同流體與其黏度

Material	Viscosity (Pa*s)
CMC solution(1%)	0.88
Glycerol	1.5
Guar Gum solution	1
Olive oil	0.084
Water	0.001

濃度計算結果如圖 3.16、圖 3.17、圖 3.18、圖 3.19 以及圖 3.20 所示。對於 CMC 溶液、關華豆膠溶液、甘油及橄欖油四種不同黏度的流體，在不考慮壓力降的情況下，其 SMX 混合器內部的混合情形在 $N_x = 8$ 、 $N_p = 5$ 及 $N_\theta = 90^\circ$ 時，能夠達到最佳混合情形。但如同 3.2.4 節所述，若考慮壓力降之變化，最佳化的幾何結構應選擇 $N_x = 6$ 、 $N_p = 3$ 及 $N_\theta = 90^\circ$ ，此因其具有略低於 $N_x = 8$ 、 $N_p = 5$ 及 $N_\theta = 90^\circ$ 的混合效果但卻有明顯較小的壓力降。然而，對於黏度最低的流體(水)，其混合情況在原先的設計，意即在 $N_x = 8$ 、 $N_p = 3$ 及 $N_\theta = 90^\circ$ 時，即可達到最有效的混合。因此，當選擇 SMX 靜態混合器作為流體混合的裝置時，若所需混合的流體黏度與水(Water)的黏度相似或更低，則可採用類似文獻中 Lim et al.[19]所使用的商用標準 SMX 幾何結構，無需進行額外的參數調整。

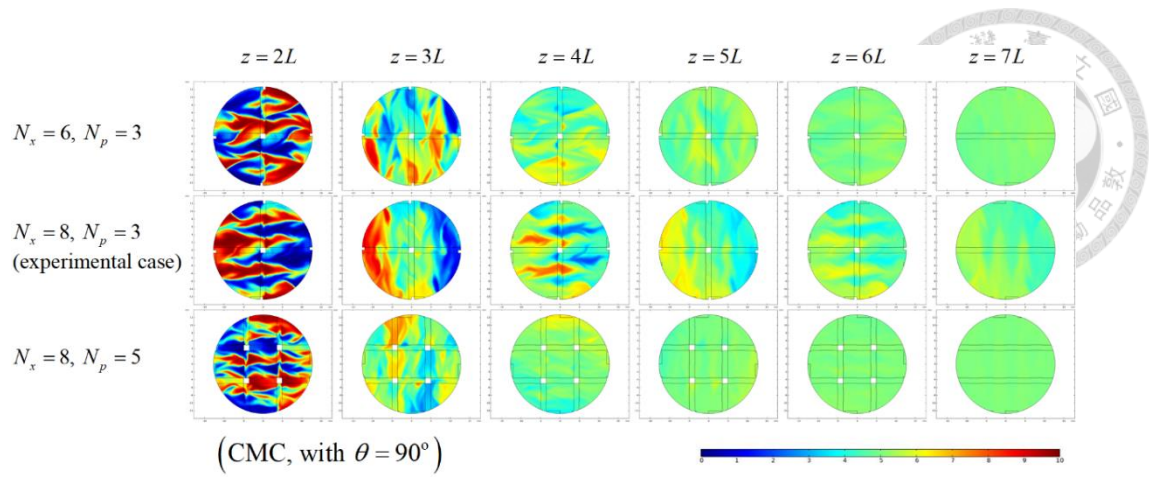


圖 3.16 不同幾何結構下，CMC 溶液中的濃度分布。

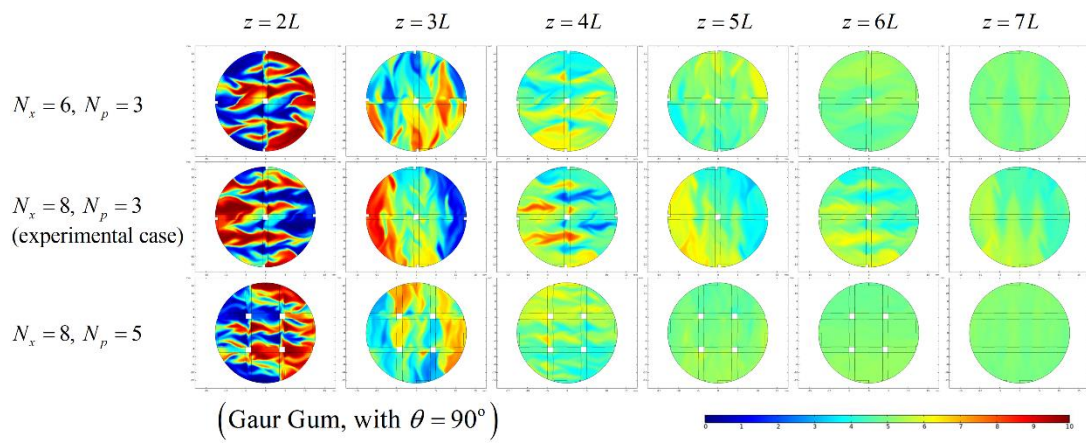


圖 3.17 不同幾何結構下，Guar Gum 溶液中的濃度分布。

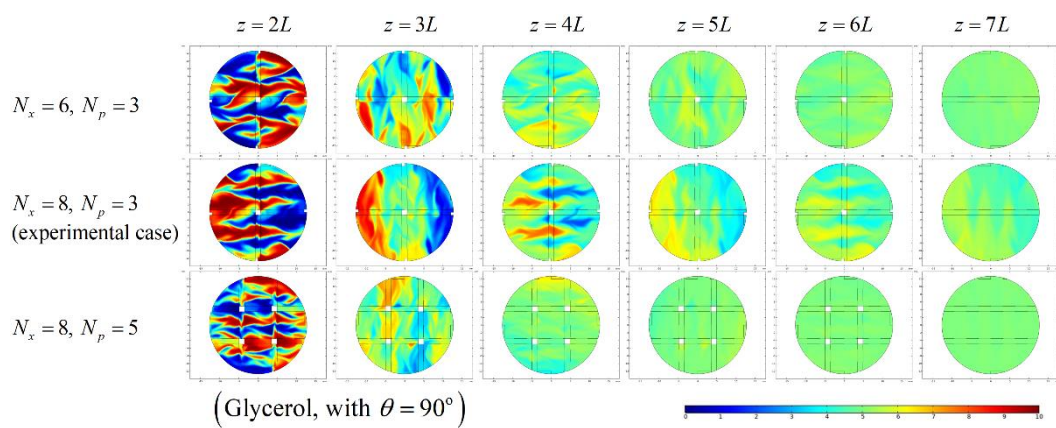


圖 3.18 不同幾何結構下，甘油中的濃度分布。

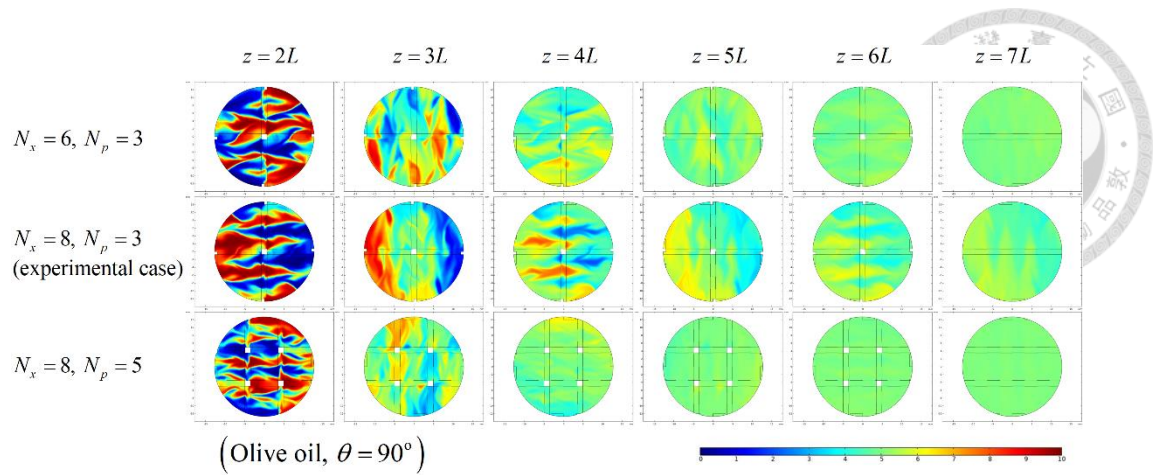


圖 3.19 不同幾何結構下，橄欖油中的濃度分布。

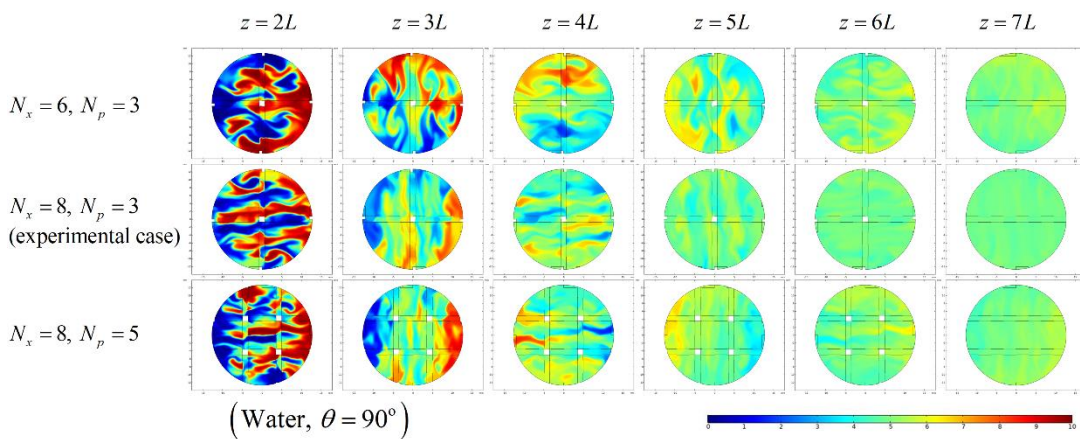


圖 3.20 不同幾何結構下，水中的濃度分布。

3.4 SMX+SCT 混合器之混合情形

在前幾節的分析和討論中，吾人探討了不同黏度之流體和 SMX 不同幾何結構之靜態混合器對於混合情況的影響。本節將設計不同突縮比(Contraction Ratio)和不同長度的突縮圓管(SCT)元件，將其與 SMX 元件結合成一項新的混合器，來探討其內部的混合情形。透過分析與計算這些元件的壓力降和混合指標，並與單純的 SMX 混合器進行比較，藉以瞭解突縮管是否能提高流道內的混合情況，且了解混合器壓力降的相對變化。關於 SMX+SCT 混合器的結構可參照本文的 2.1.2 節所述，其中 SMX 元件內部的橫桿擺放，採用於 3.2.4 小節所討論出的最佳化設計，即為 $N_x = 6$ 、 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ ，並選定不同軸向位置的截面探討其濃度分布以瞭解

流體的混合情況。本節將繪製 SMX+SCT 混合器 $2L \sim 8L$ 的截面，其中 L 為單一混合元件的長度，共繪製 7 個濃度場的二維平面，具體位置示意如圖 3.21 所示。在流體性質方面，參考表 2.1 中的相關資訊，採用文獻 Lim et al.[19]中所使用的非牛頓流體，即濃度為 1% 的 CMC 溶液。

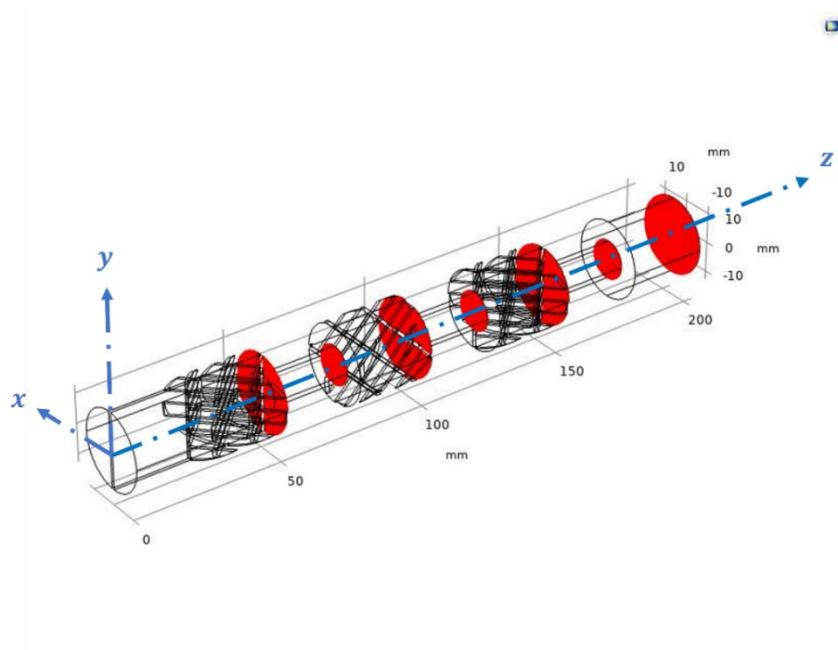


圖 3.21 SMX+SCT 混合器之截面示意圖，紅色部份顯示 7 個檢視截面。截面所在位置分別為： $2L, 3L, 4L, 5L, 6L, 7L$ 和 $8L$ ，其中 L 為單一混合元件的長度，本例中設定 SMX 與 SCT 元件的長度均為 L 。

3.4.1 不同突縮比之影響

本節模擬 SMX+SCT 混合器內的混合情形，使用稀薄質傳法對於濃度分布進行數值分析，探討不同突縮比(Contraction Ratio)的混合差異，並與 SMX 靜態混合器的相對應結果進行比較。本文所選用之突縮比為 1:4、1:16、1:36 及 1:64，在此突縮比定義為 A_c/A_0 ，其中 A_c 為突縮管段的截面積， A_0 為入口管段(即 SMX 元件管段在置入元件前圓管)的截面積。不同截面的濃度分布與相對應的混合指標之計算結果分別如圖 3.22 及圖 3.23 所示。

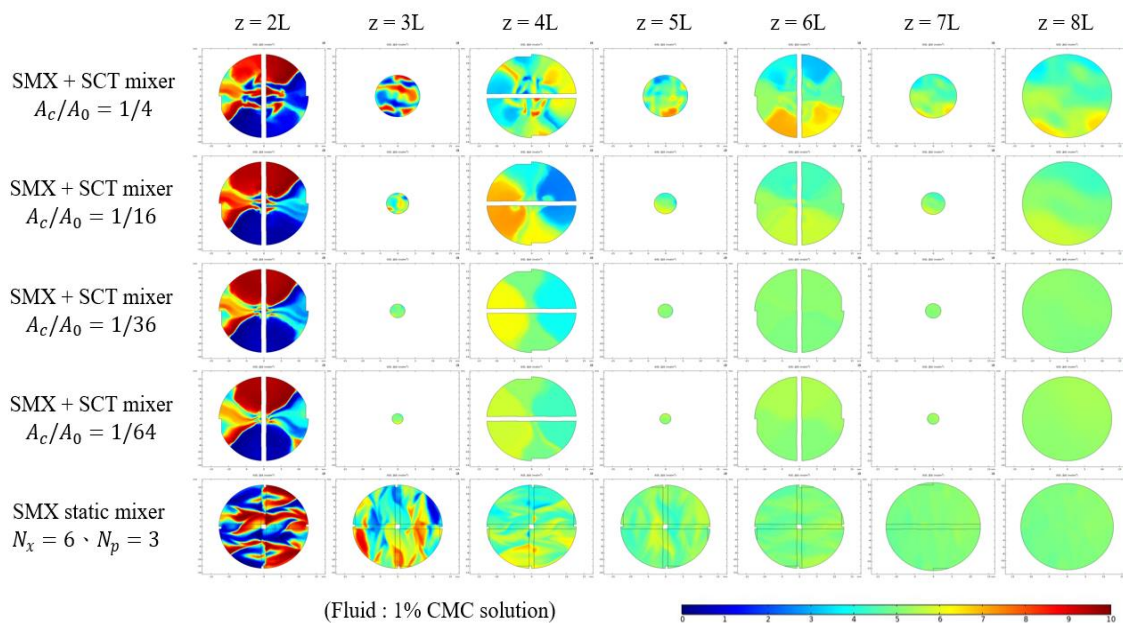


圖 3.22 SMX+SCT 混合器在不同突縮比下之濃度分布(在各個混合器元件出口截面處)，並與 SMX 靜態混合器結果(最佳化案例： $N_x = 6$ 、 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$)作比較。

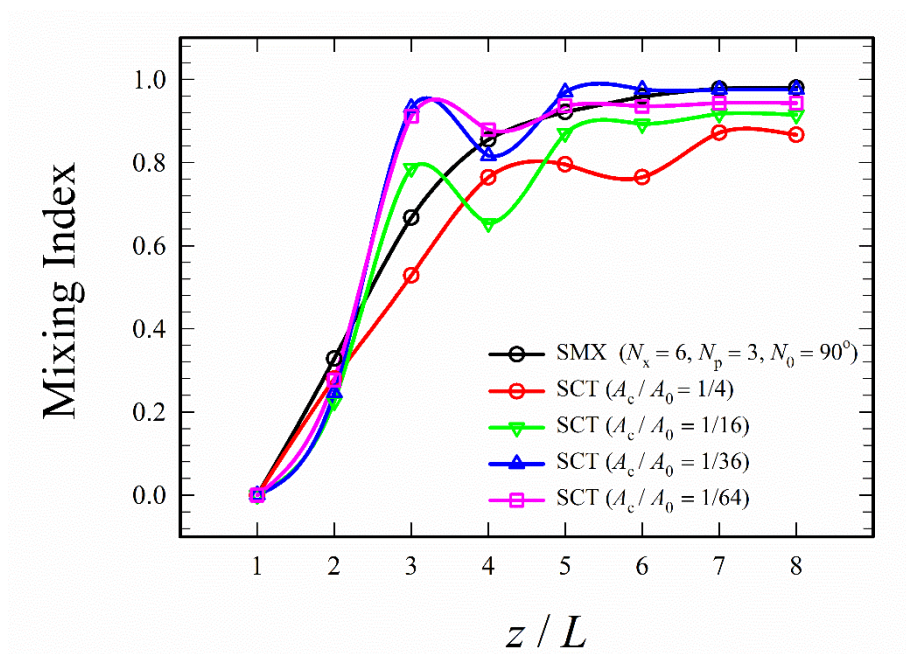
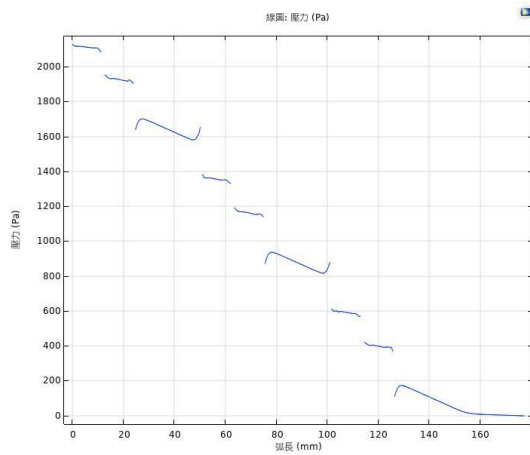


圖 3.23 SMX+SCT 混合器在不同突縮比下之混合指標(在各個混合器元件出口截面處)，並與 SMX 靜態混合器結果(最佳化案例： $N_x = 6$ 、 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$)作比較。

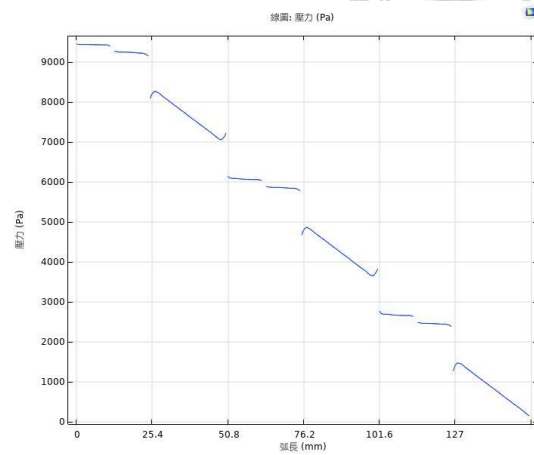


按上述結果，可知 SMX+SCT 混合器與 SMX 靜態混合器有明顯的不同，透過混合指標的計算，顯示其混合效果並未隨著流動距離的增加而穩定的上升，反倒是具有高低起伏的波動變化。除了突縮比為 1:4 的混合器之外，其餘的 SMX+SCT 混合器，在 $z=2L\sim 4L$ 處，流體經過第一個 SCT 元件時，因突縮圓管截面積的縮小，使流道內的混合效果大幅提升，但再流回截面積與流道入口一致的 SMX 元件時，混合指標的數值下降，顯示出混合效果並未逐漸變好，有不穩定的現象。接著，在 $z=4L\sim 8L$ 處，混合情形趨於穩定，隨著流動距離的增加而上升，在混合元件的末端，不同的突縮比有不同的混合效果。對照圖 3.23 不同突縮比(1/4、1/16、1/36、及 1/64)的混合器，其相對應的混合指標於混合器出口處($z = 8L$ 處)之數值分別為 0.87, 0.92, 0.98, 0.94；而 SMX 靜態混合器的混合指標為 0.98。因此可推論出突縮比為 1:36 的 SMX+SCT 混合器具有與 SMX 靜態混合器相同效果的混合，隨後將沿著 z 的壓力變化繪製成一維圖形，以瞭解不同突縮比的壓力降。

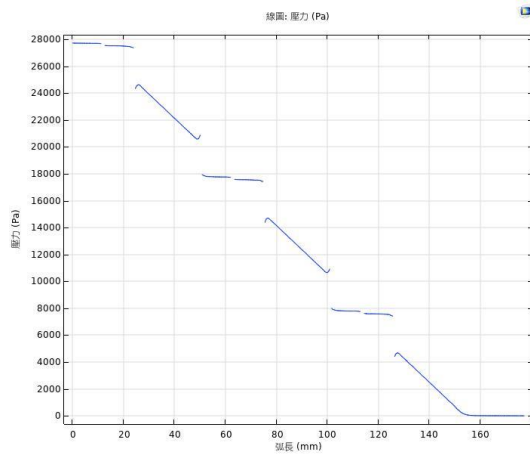
圖 3.24 為圖 3.22 不同突縮比的 SMX+SCT 混合器，其相對應的壓力變化圖，突縮比依序為 1:4、1:16、1:36 及 1:64，整體混合器的壓力降分別約為 2000Pa、9000Pa、28000Pa 及 65000Pa，圖中並繪製 SMX 靜態混合器的壓力降以供相互比較。對於 SMX+SCT 混合器，突縮比為 1:36 時，具有與 SMX 靜態混合器相同效果的混合，其混合指標皆為 0.98，但比較兩者的壓力降可發現，前者的數值(28000Pa)為後者(2200Pa)的 10 倍之多，如要令 SMX+SCT 混合器其壓力降之數值，可近似於 SMX 靜態混合器者，應選擇突縮比為 1:4 的結構，其壓力降約為 2000Pa，但其混合指標經計算為 0.88，流體混合得不夠均勻。綜合考量混合指標以及壓力降之數值，對於 SMX+SCT 混合器的選用，應為突縮比為 1:16 的結構，其混合指標與壓力降之數值分別為 0.92 和 9000 Pa，在不損失過多壓力降的情況下，流體混合的表現也不至於太差。本研究將於下一節討論不同突縮圓管 SCT 元件的長度對於壓降之影響，期望能在不犧牲混合效果的情況下，將壓降進一步的降低，以期提供另一種可行的混合器設計。



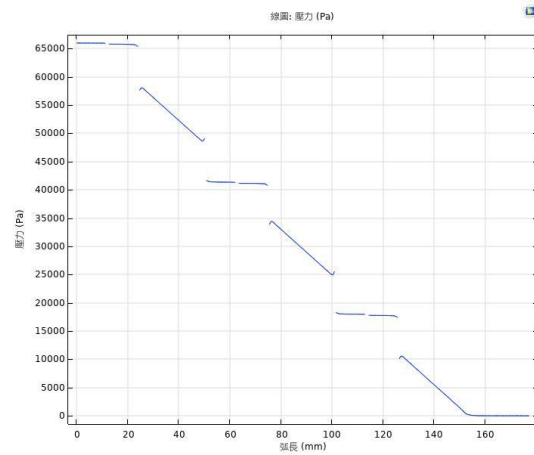
(a)



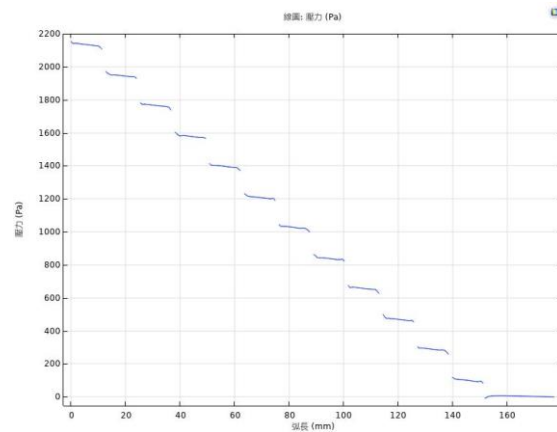
(b)



(c)



(d)



(e)

圖 3.24 SMX+SCT 混合器在不同突縮比之壓力降，並與 SMX 靜態混合器(最佳化設計)者作比較。(a)突縮比 1:4、(b)突縮比 1:16、(c)突縮比 1:36、(d)突縮比 1:64、及(e) $N_x = 6$ 、 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 之 SMX 靜態混合器。



3.4.2 不同 SCT 長度之影響

本小節模擬 SMX+SCT 混合器於混合器內的混合情形，使用稀薄質傳法對於濃度分布進行數值分析，探討不同 SCT 元件長度(l_c)對於混合情形與流道壓力降的影響，並如同前一小節的做法，與 SMX 靜態混合器的相對應結果進行比較，以瞭解 SMX+SCT 混合器能否成為與 SMX 混合器具有相同效果的混合器。於本節中，SMX+SCT 混合器所選用之突縮比為 1:16，並針對四種不同的 SCT 元件長度，分別為 $l_c=L$ 、 $L/2$ 、 $L/4$ 以及 $L/8$ 進行研究，以瞭解流體的混合情況。圖 3.25、圖 3.26 及圖 3.27 分別為 SMX+SCT 混合器不同 SCT 元件長度，其對應到的不同截面之混合結果、混合指標以及壓降圖。

按計算結果，在突縮比為 1:16 的 SMX+SCT 混合器中，若將 SCT 元件長度縮短，會導致混合效果變差，流體混合逐漸變得不均勻。透過混合指標的計算，元件長度分別為 L 、 $L/2$ 、 $L/4$ 以及 $L/8$ 的指標數值分別為 0.92, 0.89, 0.85 及 0.84，除了原始的元件長度 L 外，其餘的元件長度所計算之數值皆低於 0.9，無法產生與 SMX 靜態混合器(混合指標皆為 0.98)匹敵的混合效果。接著觀察其壓力場，不同 SCT 元件長度($l_c=L$ 、 $L/2$ 、 $L/4$ 以及 $L/8$)所產生的壓力降分別為 9000Pa, 7500Pa, 6000Pa 及 5500Pa。雖然產生的壓力降有隨著元件長度的縮短而減少，但與 SMX 靜態混合器相比，最短的元件長度 $L/8$ 的壓力降為 5500Pa，仍比 SMX 靜態混合器的壓力降 2200Pa 來得高出許多，由此可推斷出對於沒有考慮彈性效應的流體混合，SMX 靜態混合器的表現不論是在混合效率、所耗損之能量還是所佔空間等方面，都比 SMX+SCT 混合器來得更好，佔有較大的優勢，因此不需要將 SMX 元件改為 SCT 元件，使用本文第 3.2.4 節所討論出的幾何結構最佳化設計即可。

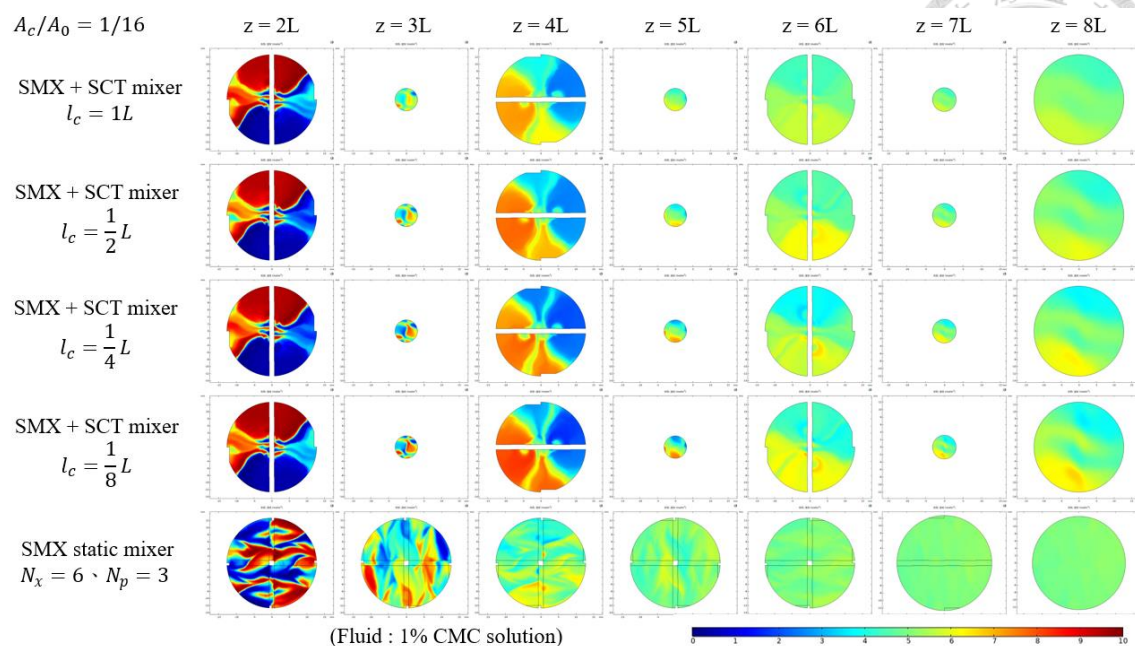


圖 3.25 SMX+SCT 混合器在突縮比為 1:16 時，不同突縮段長度下之濃度分布(在各個混合器元件出口截面處)，並與純 SMX 元件混合器(最佳化設計)的結果作比較。

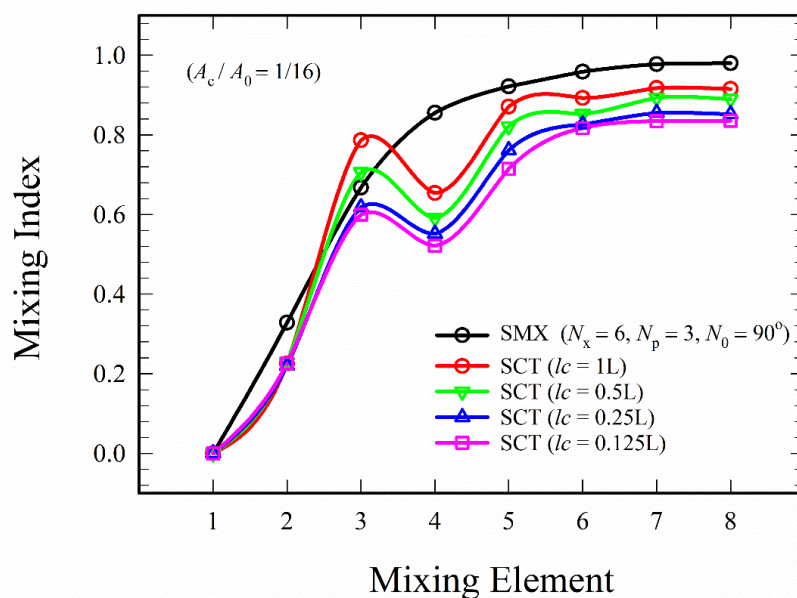
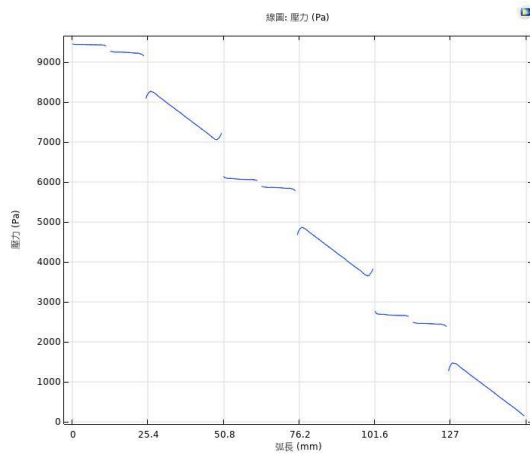
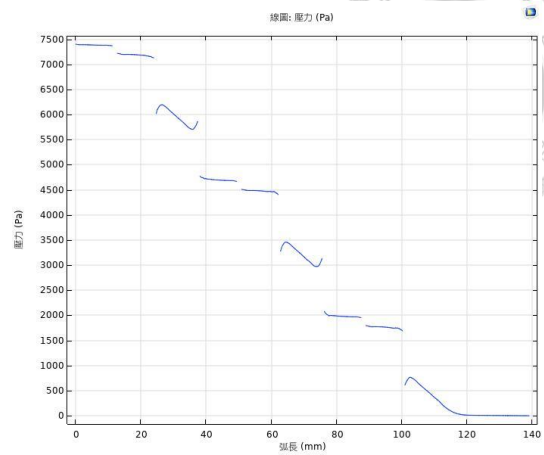


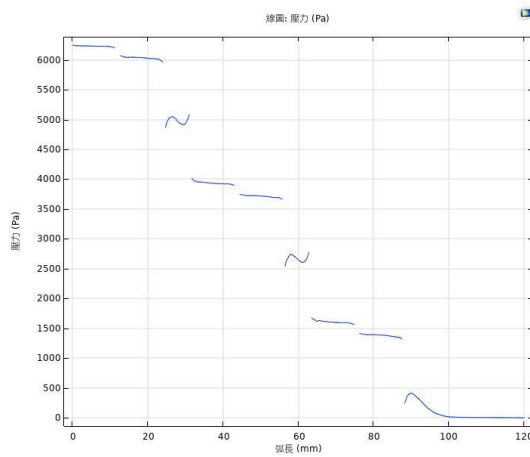
圖 3.26 SMX+SCT 混合器在突縮比為 1:16 時，不同突縮長度之混合指標(在各個混合器元件出口截面處)，並與純 SMX 元件混合器(最佳化設計)的結果作比較。



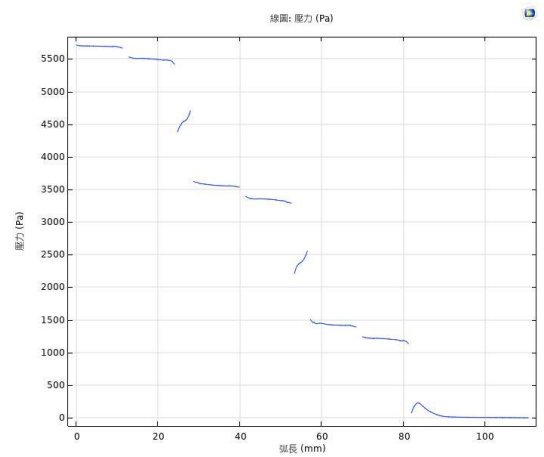
(a)



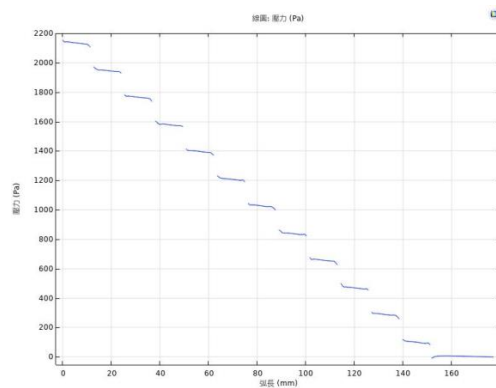
(b)



(c)



(d)



(e)

圖 3.27 SMX+SCT 混合器在突縮比為 1:16 時，不同突縮長度之壓力降，並與純 SMX 元件混合器(最佳化設計)的結果作比較。(a)突縮長度 $1L$ 。(b)突縮長度 $L/2$ 。(c)突縮長度 $L/4$ 。(d)突縮長度 $L/8$ 。(e) $N_x = 6$ 、 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 之純 SMX 元件混合器。



3.5 黏彈流體模型與實驗結果比較

本文上述計算均採用 Carreau-Yasuda Model 進行計算，該模式可適當地模擬流體的剪切稀化黏性效應、但並不知是否能足夠表現出流體的彈性效應，因此本節再引入 Giesekus Model(被認為能兼顧黏性與彈性效應者)進行計算，並與上文中利用 Carreau-Yasuda Model 算出的結果比較，以了解彈性效應對混合的影響。本節透過稀薄質傳法計算 SMX 靜態混合器內的濃度場，並與 Lim et al.[19]文獻中的實驗結果進行比較，以定性及定量的分析確認此兩種不同流體模型的準確性。本文亦分析不同流體模型的法向應力差，以瞭解造成濃度分布差異的原因。所選用之黏彈流體模型(Giesekus Model)的性質如表 3.2 所示，採用文獻 Lim et al.[19]中所使用的非牛頓流體，即 1% CMC 溶液。

表 3.2 黏彈流體所輸入參數，本表數據取自 Lim et al.[19]及 Benchabane et al.[31]。

Material	Polymer Viscosity μ (Pa*s)	Relaxation Time λ (s)	Dimensionless Mobility α
1% CMC solution	0.88	0.088	0.25

3.5.1 定性分析

使用 COMSOL Multiphysics 計算軟體，對濃度為 1% CMC 溶液進行分析，模擬流體在 SMX 靜態混合器中不同上下游截面的混合狀況。結果如圖 3.28 所示。從圖中可以觀察到，計算結果與文獻的實驗結果有一定程度相似。流體經過 SMX 混合元件後，受到互相垂直並排的橫桿影響而拉伸、折疊、轉向，造成更多的流體碰撞，從而實現更好的混合效果。接著比較不同的流體模型，兩者在整體的混合趨勢上，與實驗結果相似，但仍可發現採用黏彈流體模型(Giesekus Model)者具有較好的混合狀況，能看出每個截面的濃度分布與 Carreau-Yasuda Model 者有些許的不同，推測出黏彈流體模型的模擬結果更為貼近實驗結果。

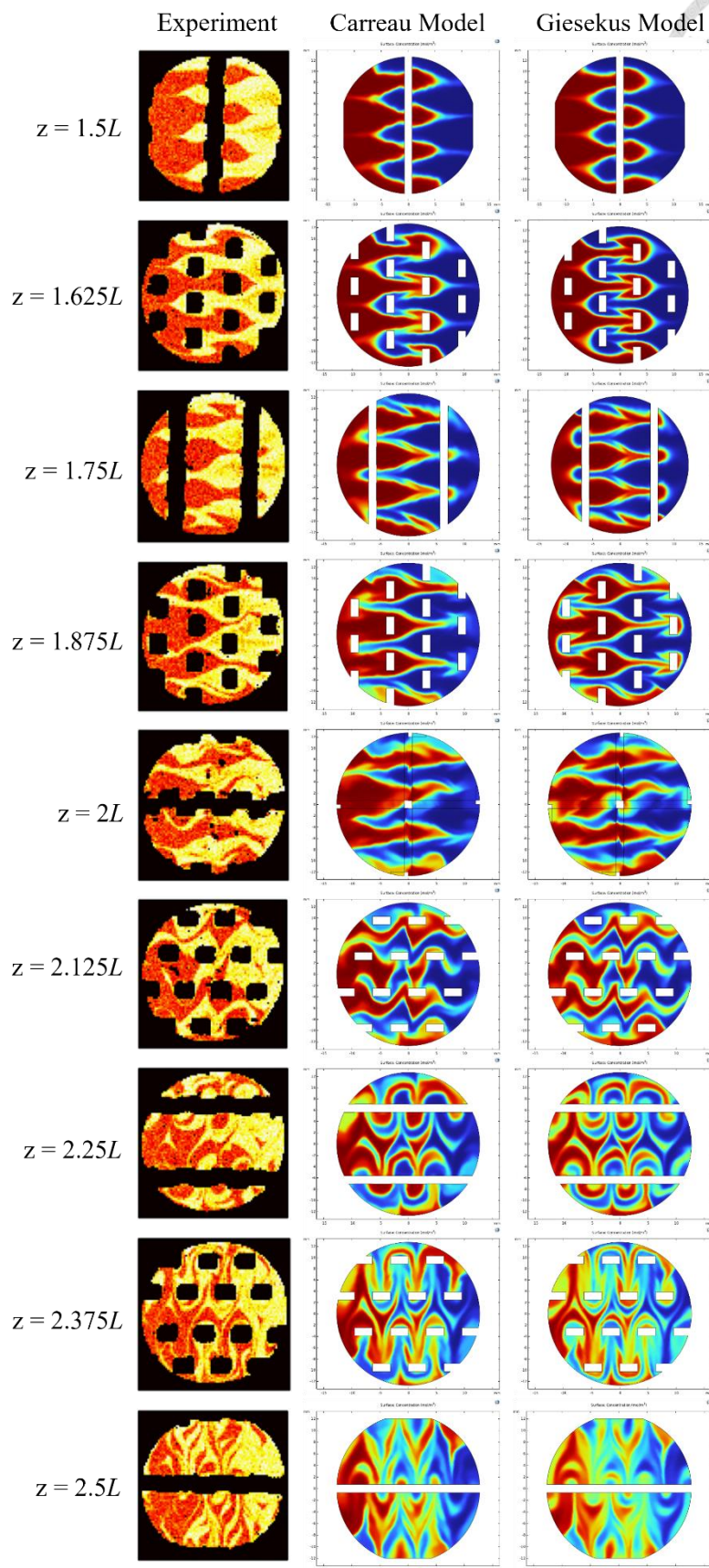


圖 3.28 非牛頓流體(CMC solution)之混合情形，“Experiment”為 Lim et al.[19]之實驗結果。本文採用兩種不同流體模型來執行混合的數值分析。



3.5.2 定量分析

本節用來量化混合程度的定義不同於本文第二章所述者，這是因模擬與實驗所計算與量測之數據有所不同造成的差異，模擬是計算流道內的濃度，而實驗是量測流道內的影像光強度。根據 Lim et al.[19]的研究內容，其使用一階統計數(First order statistics)定量化試驗結果的混合情形。一階統計數包含變異數(Coefficient of variation，代號 CV)以及分離強度(Intensity of segregation，代號 I)。這兩個統計數的定義如下：

$$CV = \frac{s}{\bar{X}} \quad (3-3)$$

其中 s 為某一軸向截面，影像光強度的標準差(standard variation)； $\bar{X}$ 為該截面影像的平均光強度。在工業混合器的設計中，為了達到期望的 CV 值(如 0.05 或以下 [19])，經常需要計算所需的混合器元件數量。

$$I = \frac{s^2}{s_0^2} \quad (3-4)$$

其中 s^2 為某一軸向截面，影像光強度的標準差平方； s_0^2 為混合入口處之截面，影像光強度的標準差平方。

圖 3.29 和圖 3.30 為不同流體模型、其變異數與分離強度計算結果隨無因次軸向距離(z/L)的變化，並與 Lim et al.[19]實驗結果作比較。觀察到 CV 與 I 隨著流體經過的 SMX 混合元件增加，兩項數值逐漸下降，表示混合效果逐漸變好，且兩種不同的流體模型，與實驗結果定性相似，皆能反映實驗的真實情況。透過 CV 與 I 的趨勢，瞭解具有彈性效應的黏彈模型(Giesekus Model)，其所模擬的數值結果更為貼近實驗結果，較為適合模擬含有聚合物分子之流體 CMC 溶液。

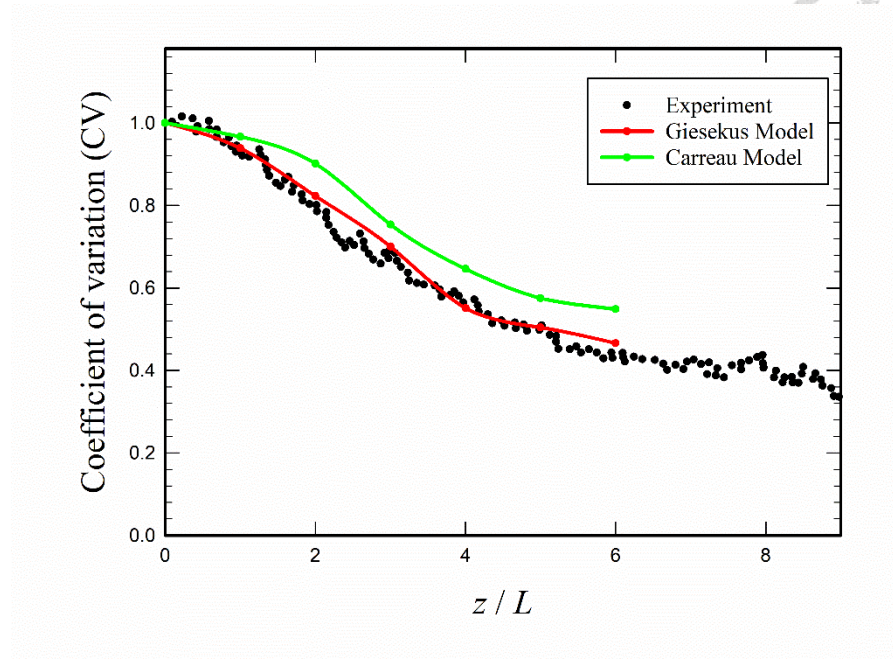


圖 3.29 變異數(CV)沿混合器無因次軸向距離(z/L)的變化，“Experiment”為 Lim et al.[19]之實驗結果。本文採用兩種不同流體模型來執行混合的數值分析，以反映實驗的真實情況。

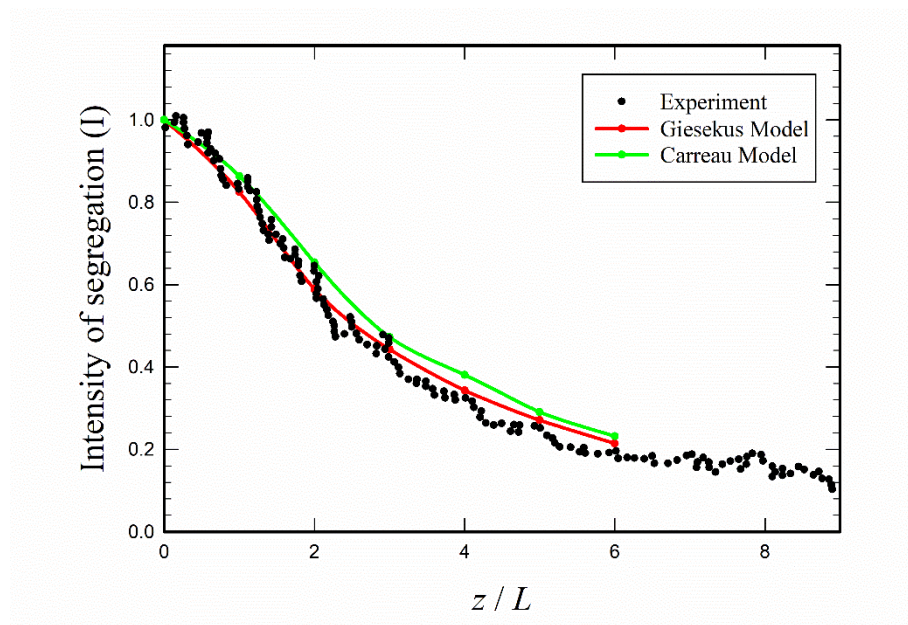


圖 3.30 分離強度(I)沿混合器無因次軸向距離(z/L)的變化，“Experiment”為 Lim et al.[19]之實驗結果。本文採用兩種不同流體模型來執行混合的數值分析，以反映實驗的真實情況。

值得注意的是，Lim et al.[19]在實驗中透過量測影像光強度的標準差來評估混合效果，而本研究使用 COMSOL 模擬軟體計算濃度場，所得數據為濃度的標準差。為了比較兩者之間的混合效果，必須將這些數據進行轉換。圖 3.29 顯示將模擬的濃度數據轉換為實驗中的光強度以計算變異係數(CV)的結果。由於光強度的數值具有下限值，因此計算出的變異數不會為 0。圖 3.29 可以觀察到在流道末段($z/L=9$)的位置，變異數約為 0.4，尚未達到工業混合器設計中的期望值。透過文獻中提供的光強度與濃度的校正曲線，本研究另將實驗中的光強度轉換為模擬的濃度數據以計算混合指標(MI)的結果。圖 3.31 顯示不同流體模型的混合指標隨無因次軸向距離(z/L)的變化，並與 Lim et al.[19]實驗結果作比較。結果顯示隨著 z 的增加，MI 逐漸上升，於流道末段的位置，兩種不同模型(Giesekus & Carreau-Yasuda)的混合指標分別為 0.98 和 0.92，符合工業混合器設計中的期望值。透過混合指標的趨勢，可瞭解具有彈性效應的黏彈模型(Giesekus Model)所模擬的數值結果更為接近實驗結果，較為適合模擬含有聚合物分子之流體 CMC 溶液。

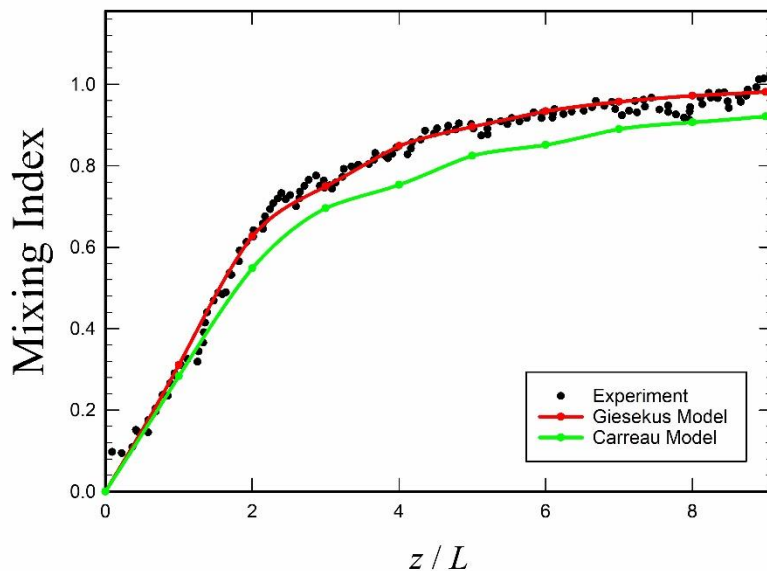


圖 3.31 混合指標(MI)沿混合器無因次軸向距離(z/L)的變化，“Experiment”為 Lim et al.[19]之實驗結果。本文採用兩種不同流體模型來執行混合的數值分析，以反映實驗的真實情況。



3.5.3 法向應力差

如同本文 1.1 節所述，根據 Bird et al.[1]將第一法向定義為流場的主流方向，此方向之單位向量本文稱之為 $\mathbf{n1}$ 。第二法向定義為與第一法向垂直、且為流場變動最大的方向，此方向之單位向量本文稱之為 $\mathbf{n2}$ ，第三法向則被定義為 $\mathbf{n1} \times \mathbf{n2}$ 的方向(本文稱之為 $\mathbf{n3}$)。在以 $(\mathbf{n1}, \mathbf{n2}, \mathbf{n3})$ 為單位向量所構成的卡氏座標下，其應力張量之分量以矩陣方式表示為：

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (3-5a)$$

第一法向應力差(First normal stress difference, N_1)以及第二法向應力差(Second normal stress difference, N_2)依照定義可表示為：

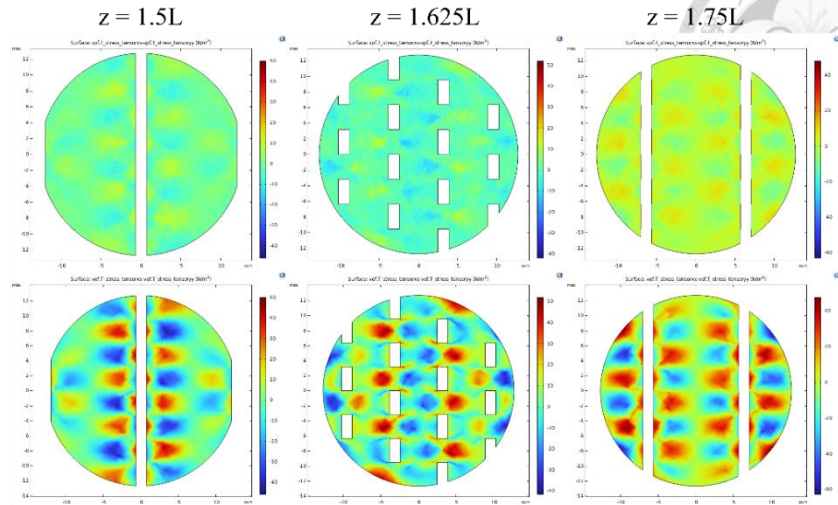
$$N_1 = \sigma_{11} - \sigma_{22} \quad (3-5b)$$

$$N_2 = \sigma_{22} - \sigma_{33} \quad (3-5c)$$

第一法向應力差的存在會影響流體的壓力分佈和速度分佈。較大的第一法向應力差會導致壓力梯度改變，從而促使流體在混合器內加速或減速，對混合過程產生一定的影響。第二法向應力差主要與黏性效應產生的剪切應力相關。較大的第二法向應力差意味著在流動過程中存在著不均勻的剪切應力分佈，這種不均勻性會導致流體在混合器內產生更強的剪切效應，從而促進混合過程。為了瞭解 Giesekus Model 與 Carreau Yasuda Model 造成其混合上的差異，本節將分析 SMX 靜態混合器內的應力場。圖 3.32 和圖 3.33 為兩種不同流體模型，在 $1.5L \sim 2.5L$ 流道長度內的 SMX 靜態混合器，其第一法向應力差以及第二法向應力差隨著軸向距離改變的截面分布。

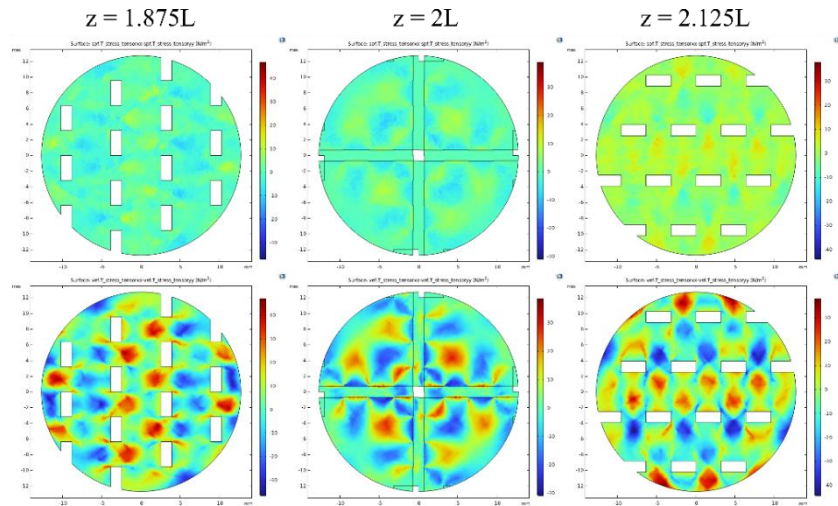
Carreau
Model

Giesekus
Model



Carreau
Model

Giesekus
Model



Carreau
Model

Giesekus
Model

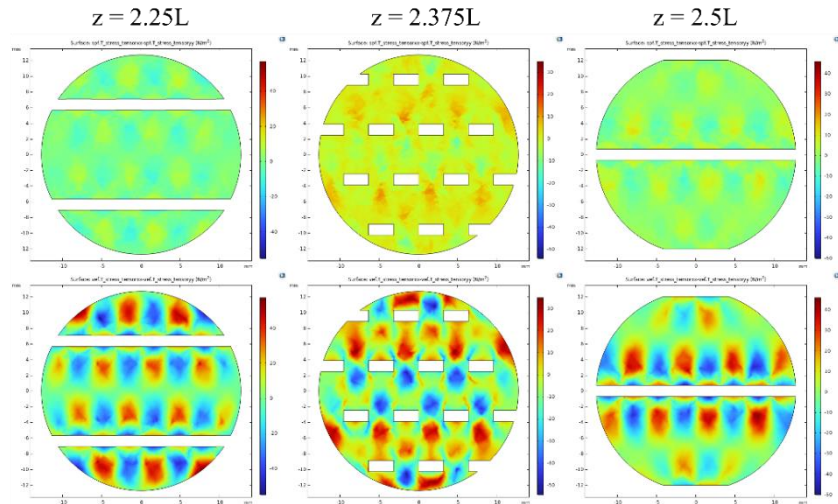
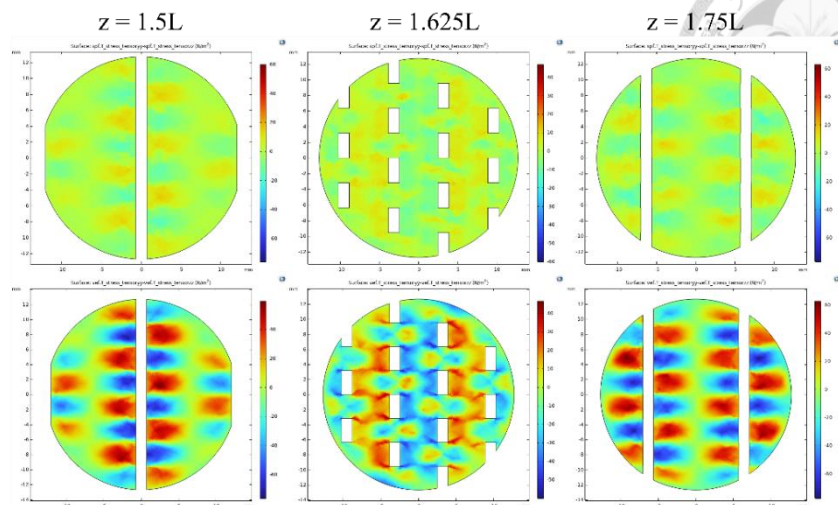


圖 3.32 第一法向應力差(N_1)隨著軸向距離改變的截面分布。本文採用兩種不同流體模型(Carreau Model 和 Giesekus Model)來執行混合的數值分析。

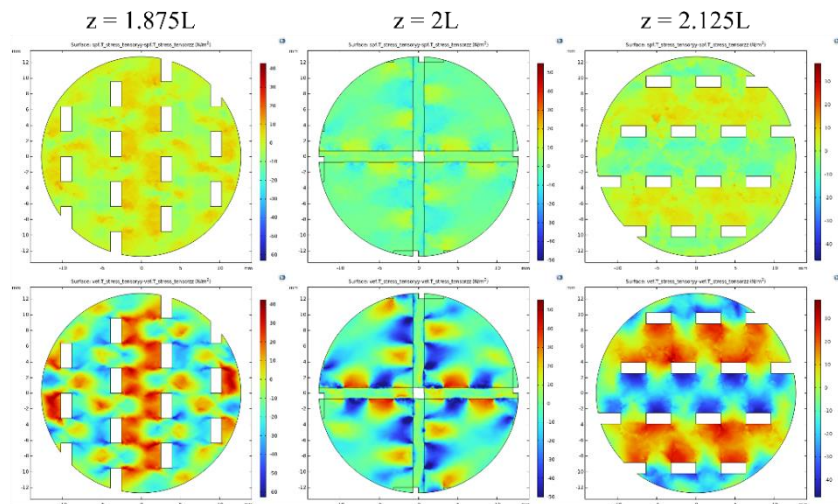
Carreau
Model

Giesekus
Model



Carreau
Model

Giesekus
Model



Carreau
Model

Giesekus
Model

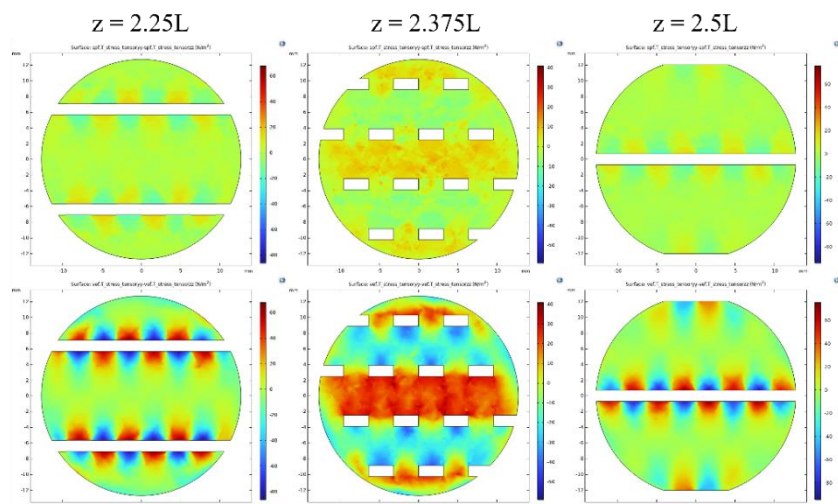


圖 3.33 第二法向應力差(N_2)隨著軸向距離改變的截面分布。本文採用兩種不同流體模型(Carreau Model 和 Giesekus Model)來執行混合的數值分析。

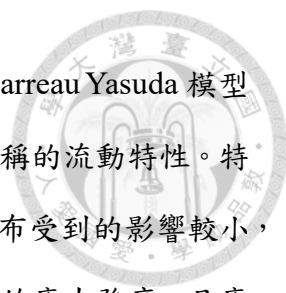


圖 3.32 為不同非牛頓流體模型的第一法向應力差(N_1)。在 Carreau Yasuda 模型中，應力分佈較為均勻，且應力強度適中，整體呈現出平穩且對稱的流動特性。特別是在混合器中心位置，應力分佈一致，顯示出其壓力和速度分布受到的影響較小，流道內部的流動相對穩定。相比之下，Giesekus 模型顯現出較高的應力強度，且應力集中的現象也較為明顯，應力分佈更為複雜且不對稱。這些特徵顯示出黏彈效應的影響，導致流動行為更加動態和複雜。在混合器元件內的橫桿附近，應力集中現象最為顯著，表示在混合過程中流體受到更大的局部應力，促使流體在混合器內的混合。圖 3.33 為不同非牛頓流體模型的第二法向應力差(N_2)。在 Carreau Yasuda 模型中，應力分佈依然較為均勻，但在某些軸向距離的應力強度有所提升，可看出應力分佈略有不均。推測是由於流動邊界條件的改變所引起的，導致局部區域的剪切應力分佈略有差異。整體而言，Carreau Yasuda 模型仍然保持其穩定和對稱的應力分佈特性。相比之下，Giesekus 模型顯現更為劇烈的應力集中現象，應力強度更高，應力分佈更為複雜。在混合器元件內的橫桿附近，應力集中現象比 N_1 更為明顯，顯示出強烈的黏彈效應。這些區域不對稱的應力分佈，呈現出高低應力交替的現象，導致混合過程中的流動行為更加不穩定，間接促使流體在混合器內的混合。

根據上述與圖 3.32 和圖 3.33 的觀察，可以得出以下結論。Carreau 模型的第一法向應力差(N_1)和第二法向應力差(N_2)均顯示出較為均勻的分佈，應力強度適中，且整體呈現平穩且對稱的流動特性。這種均勻的應力分佈意味著流體在混合器內的壓力分佈和速度變化相對平穩，剪切應力分佈均勻，有利於穩定的混合過程。相較之下，Giesekus 模型的應力分佈顯示出更高的應力強度和明顯的應力集中現象。特別是在混合器元件內的橫桿附近，第一法向應力差(N_1)導致壓力梯度明顯改變，流體速度變化劇烈，有助於加強混合效果，但也導致流動行為更加動態和不可預測。第二法向應力差(N_2)的分佈也顯示出更強的不均勻剪切應力，這種剪切效應對於促進混合過程十分重要。



3.6 不同魏森貝格數之混合情形

在流變學研究領域中，為了量化黏彈流體行為以及其與牛頓流體行為的差異，Bird et al.[1]文獻中使用無因次參數 Wi ，魏森貝格數 (Weissenberg number)，來描述黏彈流體在流動過程中的彈性效應。其定義為：

$$Wi = \lambda \cdot \dot{\gamma} \quad (3-6)$$

其中 λ 為流體的特徵鬆弛時間(relaxation time)，表示流體恢復到原始狀態所需的時間，是黏彈流體的材料性質。 $\dot{\gamma}$ 為剪切速率 (shear rate)，是流場的性質。

魏森貝格數顯示非牛頓流體中彈性力與黏滯力的相對大小，當 $Wi = 0$ 時，流體表現為牛頓流體($\lambda = 0$)，而當 Wi 越高，流體的彈性效應越顯著，流體的行為越接近純彈性固體。魏森貝格數的引入使研究人員能夠更清楚地描述和分析非牛頓流體(或稱黏彈流體)的特性和行為。

根據 Lim et al.[19]所述，SMX 靜態混合器的代表性剪切速率 $\dot{\gamma}$ 可表示為：

$$\dot{\gamma} = \frac{64 \cdot U_0}{D} \quad (3-7)$$

其中， U_0 為無混合元件時流道內的平均流速，本文如同 Lim et al.[19]之設計，數值為 10.6mm/s； D 是圓管半徑，數值為 25.4mm。透過(3-7)式可改寫(3-6)式為：

$$Wi = \lambda \cdot \frac{64 \cdot U_0}{D} = 26.71\lambda \quad (3-8)$$

透過(3-8)式以及本文 2.2.1 節的表 2.1，吾人可研究不同濃度之 CMC solution，其不同特徵鬆弛時間 λ ，來計算得到魏森貝格數 Wi ，以瞭解不同程度之黏彈效應對於混合之影響，並分析黏彈流體的流動特性。

本節透過稀薄質傳法計算 SMX 靜態混合器內的混合情形，探討不同濃度之 CMC 溶液的混合差異，並以定性及定量方式來分析黏彈流體的流動。關於 SMX 靜態混合器的幾何結構，採用文獻 Lim et al.[19]中所使用的設計，即為 $N_x = 8$ 、 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ 。模擬選用之黏彈流體模型為 Giesekus Model，其相關流體性質如表 3.3 所示。

表 3.3 不同濃度之 CMC 溶液，其相關流體性質。

CMC (%)	λ (s)	Wi
0.2	0.010	0.267
0.4	0.016	0.427
0.8	0.060	1.6
1.0	0.088	2.35

圖 3.34、圖 3.35 及圖 3.36 分別為 SMX 靜態混合器在不同魏森貝格數 Wi 下，其對應到的不同截面之混合情形、混合指標以及壓降圖。觀察圖 3.34 可以發現，不同濃度下的 CMC 溶液黏彈流體具有相似的混合效果，每個截面的混合情形並無明顯的差異。透過混合指標的計算，濃度分別為 0.2%、0.4%、0.8% 以及 1% 的 CMC 溶液，在流經最後一個具有橫桿結構的混合元件下游處，指標數值分別為 0.946, 0.946, 0.938 及 0.935，最大值與最小值的差異僅為 1.2%，亦能證實其混合的相似性。接著觀察其壓力場，不同濃度下的 CMC solution 所產生的壓力降分別為 5000Pa, 4800Pa, 4400Pa 及 4000Pa，最小值出現在濃度為 1% 的 CMC 溶液，顯示出隨著魏森貝格數 Wi 的提高，流體的黏彈效應逐漸增加，流體分子在流動中更容易發生形變，使混合過程所產生的能量耗損也隨之減少，流體的混合效果獲得改善。COMSOL Multiphysics 軟體在模擬黏彈流體存在著魏森貝格數的限制。一旦超過此模擬軟體的極限值，即使所選用之網格尺寸再合適，方程式也無法達到收斂，導致模擬結果發散。因此本文對於濃度大於 1% 的 CMC 溶液，沒有作進一步的討論。

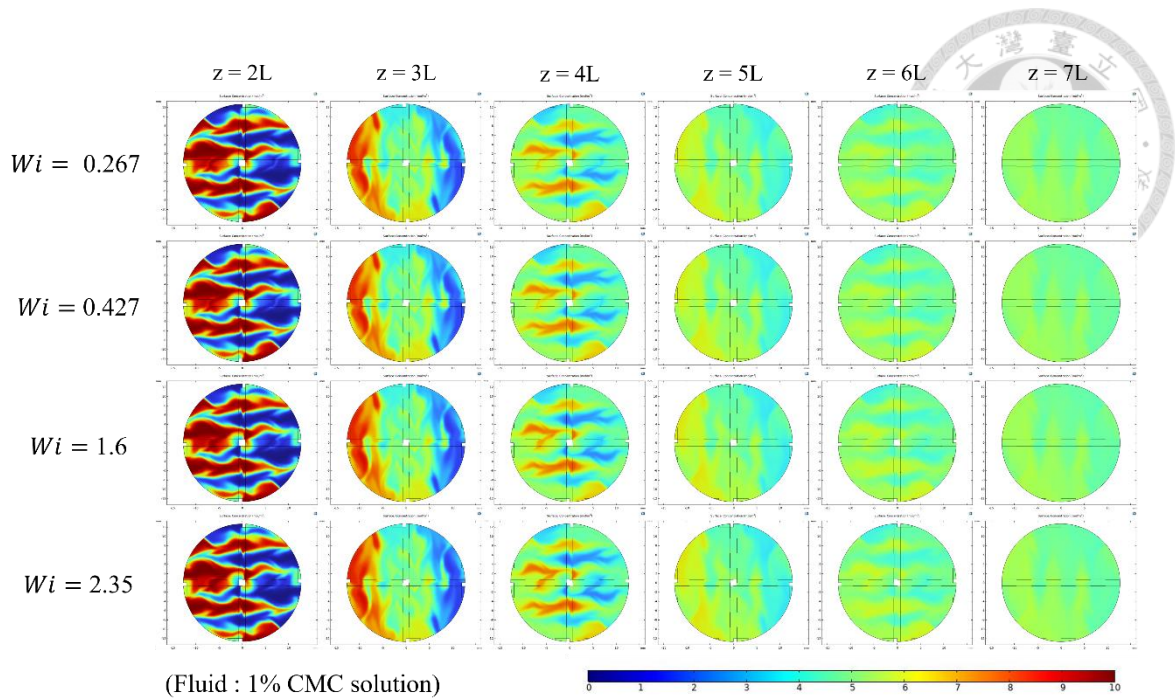


圖 3.34 SMX 靜態混合器在不同魏森貝格數(Wi)下的混合情形(在各個混合器元件出口截面處)。

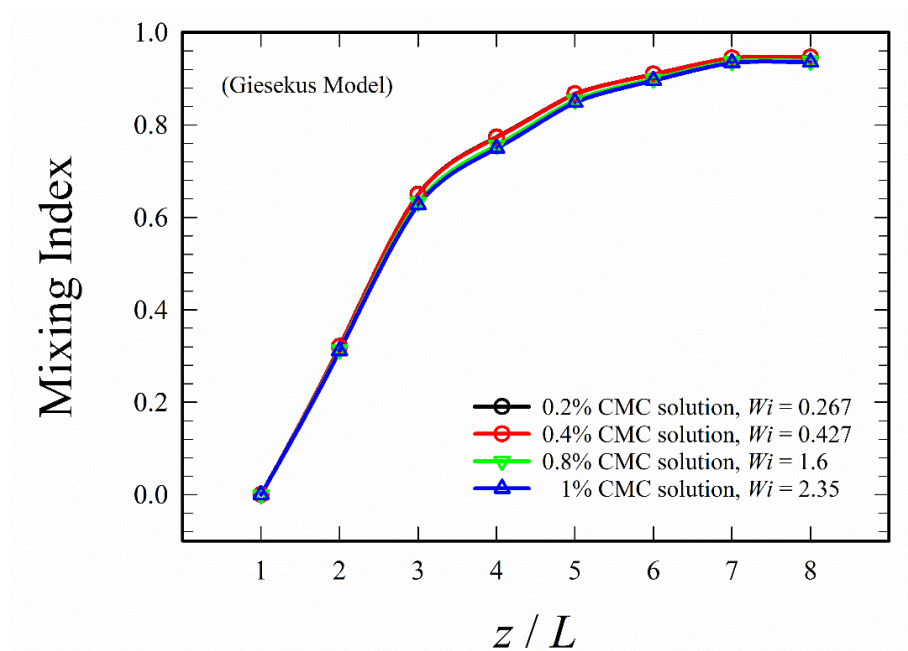
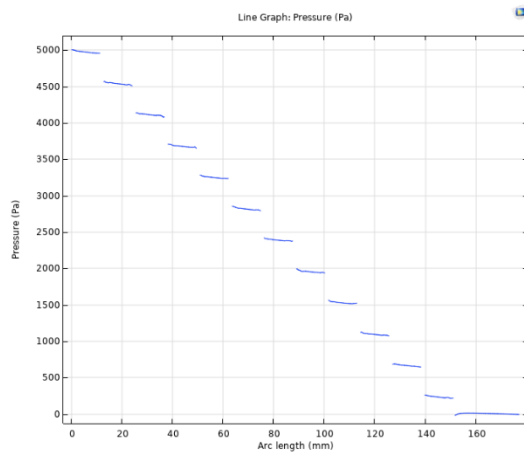
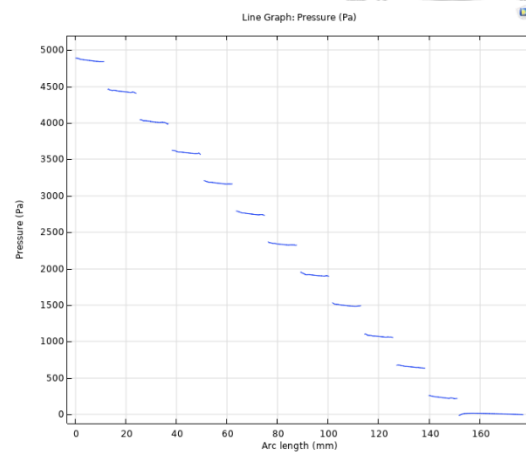


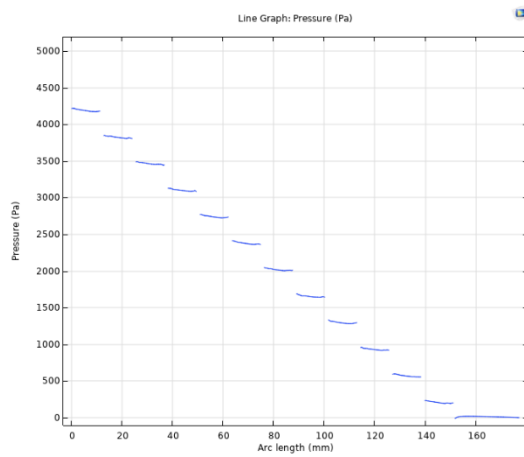
圖 3.35 SMX 靜態混合器在不同魏森貝格數(Wi)下的混合指標(在各個混合器元件出口截面處)。



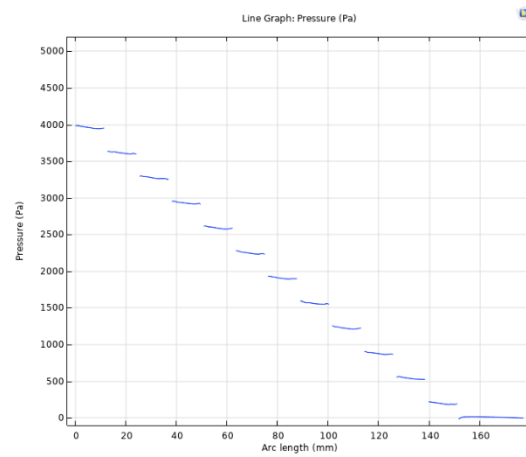
(a)



(b)



(c)



(d)

圖 3.36 SMX 靜態混合器在不同魏森貝格數(Wi)下的壓力降。(a) $Wi = 0.267$ (b) $Wi = 0.427$ (c) $Wi = 1.6$ (d) $Wi = 2.35$ 。選用的黏彈流體為 CMC 溶液。

第四章 結論與未來展望

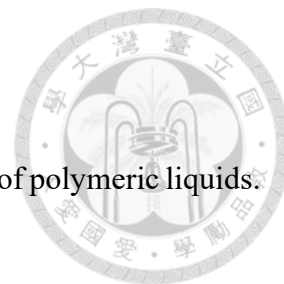


本研究系統性地探討不同幾何結構、流體特性和魏森貝格數(Wi)對於靜態混合器內流場及混合效果的影響，並通過數值模擬和實驗驗證，獲得如下結論。首先，通過調整 SMX 靜態混合器的幾何參數(N_x , N_p 和 N_θ)，確定最佳化設計為 $N_x = 6$ 、 $N_p = 3$ 和 $N_\theta = 90^\circ$ ，這能顯著提高混合效率，同時減少流道內的壓力降，從而實現更高效且節能的混合製程。接著，比較不同黏度之流體於 SMX 內的混合行為，發現對於黏度較低之流體(如水)，其在原先的設計，即 $N_x = 8$ 、 $N_p = 3$ 及 $N_\theta = 90^\circ$ 時，可達到最有效的混合，瞭解流體黏度對於幾何結構的重要性。緊接著，將突縮圓管(SCT)引入 SMX 混合器內，形成 SMX+SCT 混合器，以增加流體的彈性效應。在適當的突縮比和突縮元件長度設計下，SMX+SCT 混合器能在保持良好混合效果的同時，進一步降低壓力降。然而，相較於單純的 SM 靜態混合器，SMX+SCT 混合器在能量耗損方面明顯增加，因此需根據具體應用來選擇合適的混合器。

本研究還發現，透過模擬不同流體模型(Carreau-Yasuda & Giesekus Model)，得知 Giesekus 黏彈模型能準確預測法向應力差和彈性效應，更適合模擬黏彈流體(如 CMC 溶液)的流動，無論是定性還是定量分析，Giesekus 模型與實驗數據都能吻合良好，進一步驗證數值模擬在研究黏彈流體混合行為的有效性。最後，本文分析了不同濃度的黏彈流體，瞭解到隨著魏森貝格數(在 0.267~2.35)的增加，雖然混合效果沒有顯著的差異(猜測是因受限於所使用之軟體；文獻[32][33][34]提到當魏森貝格數達 10 的量階時，流場會趨向不穩定而猜想會促進混合)，但流體的彈性效應增強，使混合過程中的能量耗損也隨之減少，流體的混合效果獲得改善。

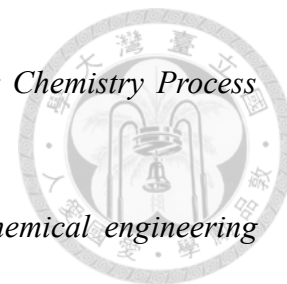
在未來的研究中，可考慮利用其他 CFD 的數值模擬軟體，如 OPENFOAM 或 ANSYS，以克服 COMSOL 在魏森貝格數方面的限制，使吾人能探索黏彈流體在更高魏森貝格數和彈性效應更大的流動行為，理解黏彈流體在混合過程中的重要特性。此外，礙於時間有限，本文未能進行兩種不同但互溶流體的混合研究，並考慮流體間的化學反應，這也是值得努力的一個方向。

參考文獻

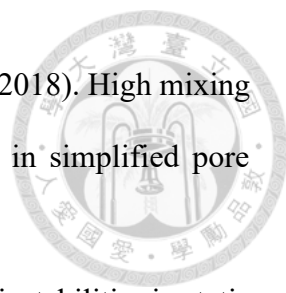


- [1] Bird, R. B., Armstrong, R. C., & Hassager, O. (1987). Dynamics of polymeric liquids. Vol. 1: Fluid mechanics, 2nd ed., John Wiley & Sons.
- [2] Bird, R. B. (2002). Transport phenomena. *Appl. Mech. Rev.*, 55(1), R1-R4.
- [3] Weissenberg, K. (1947). A continuum theory of rheological phenomena. *Nature*, 159, 310-311.
- [4] David FJ. (1966). Open channel siphon with viscoelastic fluids. *Nature*, 212, 754-756.
- [5] Kaye, A. (1963). A Bouncing Liquid Stream. *Nature*, 197, 1001-1002.
- [6] Bird, R. B., Curtiss, C. F., Armstrong, R. C., & Hassager, O. (1987). *Dynamics of polymeric liquids, volume 2: Kinetic theory*, 2nd ed., John Wiley & Sons.
- [7] Yuan, C., Zhang, H. N., Li, Y. K., Li, X. B., Wu, J., & Li, F. C. (2020). Nonlinear effects of viscoelastic fluid flows and applications in microfluidics: A review. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, 234(22), 4390-4414.
- [8] Ramsay, J., Simmons, M. J. H., Ingram, A., & Stitt, E. H. (2016). Mixing performance of viscoelastic fluids in a Kenics KM in-line static mixer. *Chemical Engineering Research and Design*, 115, 310-324.
- [9] Thakur, R. K., Vial, C., Nigam, K. D. P., Nauman, E. B., & Djelveh, G. (2003). Static mixers in the process industries—a review. *Chemical engineering research and design*, 81(7), 787-826.
- [10] Ghanem, A., Lemenand, T., Della Valle, D., & Peerhossaini, H. (2014). Static mixers: Mechanisms, applications, and characterization methods – A review. *Chemical engineering research and design*, 92(2), 205-228.
- [11] Goldshmid, J., Samet, M., & Wagner, M. (1986). Turbulent mixing at high dilution

ratio in a Sulzer-Koch static mixer. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 25(1), 108-116.



- [12] Baker, J. R. (1991). Motionless mixers stir up new uses. *Chemical engineering progress*, 87(6), 32-38.
- [13] Yasuda, K. Y., Armstrong, R. C., & Cohen, R. E. (1981). Shear flow properties of concentrated solutions of linear and star branched polystyrenes. *Rheologica Acta*, 20(2), 163-178.
- [14] Giesekus, H. (1982). A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 11(1-2), 69-109.
- [15] Liu, S., Hrymak, A. N., & Wood, P. E. (2006). Laminar mixing of shear thinning fluids in a SMX static mixer. *Chemical Engineering Science*, 61(6), 1753-1759.
- [16] Gan, H. Y., Lam, Y. C., & Nguyen, N. T. (2006). Polymer-based device for efficient mixing of viscoelastic fluids. *Applied Physics Letters*, 88(22).
- [17] Gan, H. Y., Lam, Y. C., Nguyen, N. T., Tam, K. C., & Yang, C. (2007). Efficient mixing of viscoelastic fluids in a microchannel at low Reynolds number. *Microfluidics and Nanofluidics*, 3, 101-108.
- [18] Singh, M. K., Anderson, P. D., & Meijer, H. E. (2009). Understanding and optimizing the SMX static mixer. *Macromolecular rapid communications*, 30(4-5), 362-376.
- [19] Lim, V., Hobby, A. M., McCarthy, M. J., & McCarthy, K. L. (2015). Laminar mixing of miscible fluids in a SMX mixer evaluated by magnetic resonance imaging (MRI). *Chemical Engineering Science*, 137, 1024-1033.
- [20] Mihailova, O., O'sullivan, D., Ingram, A., & Bakalis, S. (2016). Velocity field characterization of Newtonian and non-Newtonian fluids in SMX mixers using PEPT. *Chemical Engineering Research and Design*, 108, 126-138.

- 
- [21] Zhang, M., Cui, Y., Cai, W., Wu, Z., Li, Y., Li, F., & Zhang, W. (2018). High mixing efficiency by modulating inlet frequency of viscoelastic fluid in simplified pore structure. *Processes*, 6(11), 210.
- [22] Migliozi, S., Mazzei, L., & Angeli, P. (2021). Viscoelastic flow instabilities in static mixers: Onset and effect on the mixing efficiency. *Physics of Fluids*, 33(1).
- [23] Michael, V., Dawson, M., Prosser, R., & Kowalski, A. (2022). Laminar flow and pressure drop of complex fluids in a Sulzer SMX+ TM static mixer. *Chemical Engineering Research and Design*, 182, 157-171.
- [24] John, T. P., Poole, R. J., Kowalski, A., & Fonte, C. P. (2024). Viscoelastic flow asymmetries in a helical static mixer and their impact on mixing performance. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 323, 105156.
- [25] 白翊宏. (2021). 靜態混合器內混合現象的數值研究. 臺灣大學應用力學研究所學位論文, 2021, 1-67.
- [26] 賴泓翰. (2022). 互溶/不互溶流體於靜態混合器中混合的數值研究. 臺灣大學應用力學研究所學位論文, 2022, 1-62.
- [27] 賴冠廷. (2023). 突縮流道內黏彈流體混合的數值研究. 臺灣大學應用力學研究所學位論文, 2023, 1-73.
- [28] COMSOL Multiphysics. CFD Module User's Guide. 2024; Available From: <https://doc.comsol.com/6.2/doc/com.comsol.help.cfd/CFDModuleUsersGuide.pdf>
- [29] COMSOL Multiphysics. Polymer Flow Module User's Guide. 2024; Available From: <https://doc.comsol.com/6.2/doc/com.comsol.help.polymer/PolymerFlowModuleUsersGuide.pdf>
- [30] COMSOL Multiphysics. Mixer Module User's Guide. 2024; Available From: <https://doc.comsol.com/6.2/doc/com.comsol.help.mixer/MixerModuleUsersGuide.pdf>
- [31] Benchabane, A., & Bekkour, K. (2008). Rheological properties of carboxymethyl

cellulose (CMC) solutions. *Colloid and Polymer Science*, 286(10), 1173-1180.

[32] Shaqfeh, E. G. (1996). Purely elastic instabilities in viscometric flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, (28), 129-185.

[33] Groisman, A., & Steinberg, V. (2000). Elastic turbulence in a polymer solution flow. *Nature*, 405(6782), 53-55.

[34] Samanta, D., Dubief, Y., Holzner, M., Schäfer, C., Morozov, A. N., Wagner, C., & Hof, B. (2013). Elasto-inertial turbulence. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 110(26), 10557-10562.

