

第一章 緒論

1.1 簡介

微管道混合現象的相關應用相當廣泛，例如在微型燃料電池的技術發展，亦利用微管道傳輸甲醇或水等燃料，進行化學反應以產生能量，還有像是先進的微電子熱傳，微熱管、微流道或微流槽等以及如噴墨印表機之噴墨頭也是微管道傳輸現象之重要應用；在生物醫學方面，生物晶片系統也需利用微管道以傳輸不同流體以達到檢測的目的。

生物晶片-統稱為用來檢測生物反應及訊號的晶片，通常以玻璃、矽晶片、塑膠等材質為基質，利用微電子、微機械等加工技術來製成，應用範圍在醫學檢驗方面非常的廣泛，例如基因及蛋白質功能研究、新藥開發、臨床檢驗、菌種檢測、感染性疾病的診斷。依功能用途主要可分為二大類，第一類為檢測型晶片如微陣列晶片(Microarray)、基因晶片(Genechip, DNAchip 或 DNA Microarray)、蛋白質晶片(Protein chip, Protein array)，主要目的作為樣品檢測之用；第二類為處理型晶片，如縮微實驗室晶片(Lab-on-a-chip)、微流體晶片(Microfluidics)。1989 年德國的 Manz 教授[1]提出微全程分析系統(micro total analysis system, ; μ -TAS)的概念，顧名思義就是將實驗室中複雜的分析流程整合在數公分大小的晶片上，功能類似一個實驗室的縮影，在這數公分大小的晶片上佈滿著無數個微管道及微反應器，可將小至幾個微升(microliter)甚至奈升(nanoliter)

體積的樣品或試劑導入其中，讓液體在微管道中執行混合、分離、培養、或使加熱(heated)等以完成檢測，稱為晶片上的實驗室(lab-on-a-chip)簡稱實驗室晶片，一般又稱為微流體晶片。微機電系統(Micro Electro Mechanical System； MEMS)的技術就是將生化分析中所需的如微幫浦、微閥門、微過濾器、微混合器、微管道、微感測器及微反應器等元件集中製作在生物晶片上，使其具有一特殊功能進行樣品的前處理、混合、傳輸、分離和偵測等程序，通稱為微系統(Microsystem)此一系統元件的尺寸非常小，內部結構以微米(μ ；micro)計。

微混合器大約相當於一根頭髮大小的微管道，能讓兩種或多種流體混合，而微混合器混合的好壞就決定了整個反應系統的優劣；在微小的尺度下，雷諾數(Reynold number)相當的小，要產生紊流是一件相當困難的事情，不同於巨觀流場中可以利用紊流的產生來促使流體混合，因此就有相當多的設計出現。

1.2 微混合器的分類

一般而言，微混合器分類成被動式微混合器(passive micromixers)及主動式微混合器(active micromixers)兩大類[2]。被動式微混合器單純只靠構造的特殊設計來產生分子擴散(molecular diffusion)或混沌移流(chaotic advection)的效應，混合的過程通常是依靠這兩種機制來達成，完全不需外部輸入能量侵入到流場中；而被動式微混合器可再依照混合方式再分類

成：(1) 平行式層化 (parallel lamination) 、 (2) 連續式層化 (serial lamination) 、 (3) 注射 (injection) 、 (4) 混沌移流 (chaotic advection)。主動式微混合器則需要在混合器外部輸入能量，以主動的方式於流場中加入一些主動的作用 (moving parts) 造成擾動來達到混合的目的，此外部能量例如壓力、溫度、電動力、電磁力、超音波等，由於此能量的輸入需結合附加的裝置，因此主動式微混合器的結構以及製造過程也較為複雜，所需成本也較昂貴。相對之下被動式微混合器成本也較便宜，且結構較為堅固，運作也較穩定並且容易結合在較複雜的系統中，但是其混合效果不如主動式佳，兩者之間各有其優缺點；以下的文獻回顧就以微混合器的分類做綜整歸納成較具代表性者。



1.3 文獻回顧

1.3.1 被動式微混合器

被動式混合器設計的目標，就是要如何來增加兩種流體間的接觸面積，以及縮短分子間擴散的距離來增加分子擴散的效應，以下將以各種不同的混合原理作一介紹及文獻回顧。

1. 平行式層疊 (parallel lamination)

平行式層疊的主要原理通常是將流道的入口設計成 n 個，然後將兩種或多種流體於不同分支入口注入，然後使各種不同流體在流道中結合為一，相互平行的流動造成層疊 (laminae)，最典型的設計例如 T 型管和 Y 型

管混合器；像這一類的設計如 1999 年 Kamholz 等人 [3] 以及 2000 年 Ismagilov 等人 [4] 所做的對於 T 型管以及 Y 型管中混合現象的實驗研究，在這種型態的混合器當中是完全依賴分子擴散的作用，因此通常需要較長的管道才能達到混合的效果，所以將 T 型及 Y 型管的改良如 2003 年 Yi 和 Bau [5] 所設計的混合器是將 Y 型管道的下游設計一 90 度的彎曲造型，他們研究結果指出，在雷諾數大於 10 時彎曲處會產生渦流，在雷諾數大於 30 時可以達到完全的混合。2001 年 Gobby 等人 [6] 使用 CFD 的方法模擬 T 型管道微混合器，在他們研究結果指出，改變入口管道的角度時對混合效率及壓力降的變化並沒有特別的影響，縮小管徑產生節流作用時(如圖 1-1 所示)可增加混合效率，但會造成較大的壓降。

2. 連續式層疊(serial lamination)

連續式層疊的原理主要是將流體分離(split)然後再結合(join)的方式，將兩種流體連續的層疊增加相互間的接觸面積，來促進混合。1996 年 Schwesinger 等人 [7] 所設計的微混合器如圖 1-2 所示，利用這種幾何外型將兩流體不段的分合，達到增加流體間的接觸面積而快速混合；1996 年 Branebjerg 等人 [8]也是利用此概念，在他們的研究結果中得到不錯的混合效率。

3. 注射(injection)

注射法通常是利用噴嘴陣列，將液體 A 經由噴嘴注入佈滿液體 B 的混合區中，如此可增加兩種流的接觸面積，如 1993 年 Miyake 等人 [9]

他們利用 400 個排列成方形的噴嘴陣列將混合液注入混合區(如圖 1-3 所示)，增加兩液體的接觸面積，達到混合快速的變化；以及 1999 年 Larsen 等人 [10] 使用相同的概念只是不同的噴嘴形狀。2000 年 Voldman 等人 [11] 使用一種被動式的閥來作為流體的釋放裝置，來控制流體。

4. 混沌移流(chaotic advection)

在微混合器中要產生混沌移流的效應，基本的概念為改變流道的幾何外型，而在流道的外型上並沒有一特定的分類，以下就以雷諾數範圍分別為 $Re < 10$ 、 $10 < Re < 100$ 以及 $Re > 100$ 來分類，作以下文獻回顧。

(1) $Re < 10$

2002 年 Johnson 等人 [12] 首先研究將管道的底部設計成一系列直形斜凹槽的結構(straight ridges micromixer; SRM)如圖1-4所示，利用此結構發現管道內會產生一種混沌移流的效應，並且可加速兩種流體的混合；2002 年 Stroock 等人 [13] 並且設計出另一種像人字形一樣的凹槽結構稱為人字形凹槽微混合器(staggered herringbone micromixer; SHM) 如圖 1-5所示，並且在雷諾數 0.01 時實驗上發現， $\ln(Pe)$ 和達到混合長度(90%混合)時的管道長度成線性關係即 $\Delta y_m \sim \lambda \ln(Pe)$ ，而 SHM 的混合效果比 SRM 較佳。

2004 年 Kim 等人 [14] 設計一種新型的微混合器稱為“barrier embedded micromixer”(BEM) 如圖 1-6 所示，概念為在直形斜凹槽結構的管道上壁放置障礙物，並且用實驗的方式與平滑壁面和直形斜凹槽(SGM)

兩種微混合器做比較，他們的研究結果指出，此 3 種混合器的混合效率皆隨著雷諾數增加而下降，其中 BEM 可得到最好的混合效率，而 $\ln(Re)$ 和他們所定義的一種特徵混合長度(Characteristic required mixing length)成正比關係。

在數值模擬方面，2003 年 Wang 等人 [15] 利用 CFD 商用軟體 MemCFD™ 來模擬直形斜凹槽微混合器(SRM)，探討其中的流場型態。模擬結果發現，當 $Re = 5$ 時較淺的凹槽深度($\alpha = 0.05$)並沒有發現不規則的流場型態出現，而當凹槽加深時($\alpha = 0.3$)流場的型態變的混亂不規則，而他們卻無法證明這就是混沌移流的現象；並且發現在流場中出現一環流(circulation)時的管道長度與凹槽深度 α 成指數的關係，與流速無關。

2004 年 Schonfeld 和 Hardt [16] 將管道設計成上下交錯，並傾斜不同方向的直形斜凹槽的結構（如圖 1-7 所示），並利用數值計算的方式來模擬，他們指出在上下壁面分別放入傾斜溝槽時混合效率有明顯的提高。

2004 年 Kang 和 Kwon [17] 利用一種數值方法稱為“colored particle tracking method” (CPTM) 模擬分別為斜直凹槽 (SGM)、人字型凹槽(SHM) 以及在斜直凹槽之間放置阻塊(BEM) 3 種不同結構的微混合器，此種數值方法特別的是只在單一週期的結構上做週期性的計算，而模擬的結果和 2002 年 Stroock 等人 [13] 實驗的結果比較，混合的趨勢上很接近但不是很精準，這 3 種混合器的混合效率比較發現，人字型溝槽(SHM)的混合器有最好的混合效率，其次為(BEM)最差為(SGM)。

2005 年 Howell 等人 [18] 所設計의 微流道如圖 1-8 所示，他們將斜直型凹槽及人字型凹槽同時設計在流道的上壁及下壁，並且發現此設計可使流場中產生一對於上下的橫向流動現象，以及左右各一對渦流的型態造成渾沌對流的效應達到混合效果。從實驗及模擬上發現；在這種設計上，較短的流道長度就能達到不錯的混合效率，而較深的凹槽深度(1.02 mm)其混合效率卻不及於較淺的凹槽深度(0.76 mm)。

2005 年 謝 [42] 利用 CFD 的數值方法模擬微混合器中的混合現象，所探討的微混合器構造包括了：直形斜凹槽(SRM)、人字形凹槽(SHM)、雙邊直形斜凹槽以及設計了一種具傾斜阻塊人字形凹槽的構造，他分別稱為 Double SRM 及 OBSHM。於他的研究中是針對在 $Re = 0.01$, $Pe = 2000$ 時，結果指出 SRM 的凹槽加深或加寬時混合效率有明顯的提升，而 Double SRM 的混合效率卻不及 SRM 的凹槽加深或加寬的結果；而 OBSHM 具有最好的混合效率，是最佳的選擇。

(2) $10 < Re < 100$

2000 年 Lin 等人 [19] 設計了一種三維蜿蜒管道微混合器 (如圖 1-9 所示)，此結構類似由一系列 C 型構造所組成，他們的研究結果指出，此種混合器要達到較佳的混合效率需在較高的雷諾數範圍，雷諾數約在 25 至 70 之間才會發生混沌移流的效應。2003 年 Vijayendran 等人 [20] 所設計의 微混合器(如圖 1-10 所示)類似由一系列 L 型結構所組合而成，他們分別以雷諾數 1、5 和 20 作測試，研究結果指出，此結構的混合器也是

要在較高的雷諾數才可達成較佳的混合效率。2004 年 Chen 和 Meiners [21] 設計了一種外型較為複雜的三維蜿蜒管道微混合器(如圖 1-11 所示)，他們的研究結果指出，此結構的混合器只要在雷諾數 0.1 至 2 之間時就可達到相當不錯的混合效率。

2004 年 Park 等人 [22] 所設計的一種外型更為複雜微混合器(如圖 1-12 所示)，可使管道中的流體產生旋轉及分離的混沌移流效應，他們分別以雷諾數 1、10 和 50 作測試，研究結果指出，在雷諾數為 10 的混合效率較佳，其次為 1 和 50。2003 年 Jen 等人 [23] 設計了三種扭轉形狀的微混合器(如圖 1-13 所示)，並利用數值計算的方式模擬這三種混合器，研究結果發現，此三種混合器均能產生混沌移流的效應，達到相當不錯的混合效率。



(3) $Re > 100$

2002 年 Wang 等人 [24] 將 Y 型管道中放置圓形障礙物(如圖 1-14 所示)，採數值計算的方式模擬此微混合器，他們研究結果指出，在低雷諾數時並不會產生渦流，並且證明說放置障礙物必需要在高雷諾數時才能改善混合效率。2003 年 Lin 等人 [25] 也是用相同的方式，是將圓形障礙物放置在狹小的管道中來提高混合效率，他們研究結果指出，雷諾數在 200 到 2000 之間才能得到較佳的混合效率。

2002 年 Mengeaud 等人 [26] 設計了一種外型為鋸齒狀的微混合器(如圖 1-15 所示)，他們研究 Peclet number 固定為 2600 以及 Reynold number

的範圍從 0.26 到 267 之間，結果發現到一臨界雷諾數為 80，而在雷諾數為 80 以時的混合過程完全藉由分子擴散造成，而在較高的雷諾數時在轉角處容易產生渦流，可有效的改善混合。

1.3.2 主動式微混合器

由前所提，主動式微混合器是靠著在外部輸入能量，來擾動內部流場達到混合目的，以下就以擾動的類型作一介紹及文獻回顧。

1. 壓力擾動(pressure disturbance)

2003 年 Fujii 等人 [27] 利用外加的微泵浦(micropump)裝置產生壓力擾動來驅動流體，他們指出這種裝置的連接較容易，且運作穩定，混合反應快速。另一種壓力擾動的方式如在入口施加脈動式的速度，如 2003 年 Glasgow 和 Aubry [28] 利用數值方法模擬 T 型管道微混合器，並且在 T 型管兩個入口同時施加脈動速度，雷諾數為 0.3 時，發現可得到較佳的混合效率。

2. 電動力擾動(Electrokinetic disturbance)

將電動力加入到微流道中的液體，可達到驅動流動加速混合的目的，如 1999 年 Jacobson 等人 [29] 利用電動力驅動 T 型管混合器中的液體，他們研究分別考慮平行式及串連式的混合方式，結果發現串連式的混合效果較好。2001 年 Oddy 等人 [30] 所設計的混合器(如圖 1-16 所示)，將兩流體分別注入到混合器中，然後再匯集到混合室中施加高電壓，使驅動兩流體產生不穩定的混合。

3. 超音波擾動(Acoustic disturbance)

利用超音波的方式如 1998 年 Zhu 和 Kim [31] 利用壓電性材料在混合區中，底部被覆蓋一層同心環狀薄膜，以 240 或 480 MHz 之正弦波振動，進而加速液體的混合。2001 年 Yang 等人 [32] 利用混合室外加入一個壓電材料(PZT)，然後將壓電材料通電產生超音波，而音波使得混合室產生震動促進兩液體混合。

4. 熱擾動(Thermal disturbance)

由於溫度的變化會影響到擴散係數，因此也有人利用熱能的效應來提高混合。2002 年 Mao 等人[33] 在跨過很多的平行流道之間產生一線性的溫度梯度，研究溫度對於螢光染料的影響。另一種設計如 2002 年 Tsai 等人 [34] 在一曲折的微流道中，利用微泵浦使管道中產生熱器泡，再藉由熱氣泡的爆炸造成兩種液體的接觸面積成波浪狀，以達到混合效果。

1.4 研究目的

由以上的文獻發現，微混合器混合的好壞就決定了整個反應系統的優劣，由於微管道傳輸現象因受限於微米幾何尺寸的限制，進行精密實驗量測流場十分不易，因此有效的利用計算流體力學的數值方法，來模擬分析微管道中的現象，為本文主要目的。首先在 2005 年 謝 [42] 的論文當中認為，由於流道中的凹槽是週期的幾何外型，因此他都是另外再建立一段週期的結構，來做週期性的計算，而這種週期性的計算是指將計算到收斂

後出口的速度代回到入口作為邊界條件再計算到收斂，並且反複實行以獲得週期性的速度分佈，而這種方法相當的花費時間，而對於壓力並無特別的處理造成週期性的速度當中壓差相當的不合理；而在解濃度場方面就是利用這週期性的速度分佈，並也將濃度做週期性的計算以獲得下游的濃度分佈。本論文首先為延續 2005 年 謝 [42] 的論文，主要概念為建立較長的管道長度，截取中間一段週期性的速度分佈做為濃度場的計算，濃度場方面還是以週期性的計算方式，來獲得下游的濃度分佈，其中詳細的差異於第四章第一節中詳述；分別再探討對直形斜凹槽混合器(SRM)中，如凹槽深度、凹槽寬度、凹槽斜角以及雙邊直形斜凹槽(Double SRM)等可能對混合效率所產生的影響。接著再對人字形凹槽(SHM)、具傾斜阻塊人字形凹槽(OBSHM)，以及如果只具有阻塊(block)結構等各種不同外型的微混合器，比較當中的混合效果及對混合的影響，希望可以提供重要的設計參數給設計者及實驗者，設計並製作出快速、高效率、節省成本與應用廣範的微流體輸送裝置。

第二章 數學模式

2.1 物裡模型

本文所模擬的流道形狀分別為：直形斜凹槽(SRM)、人字形凹槽(SHM)、雙邊直形斜凹槽(Double SRM)、具傾斜阻塊人字形凹槽(OBSHM)以及只具有阻塊(Block)等不同型態的流道，其幾何圖形如圖 2-1 到 2-6 所示，所有的管道高度 h 均為 $70 \mu m$ ，寬度 w 均為 $200 \mu m$ ，對於凹槽及阻塊的尺寸在往後的模擬中都會有所變動，分別於第四章中詳述；在以下所註的管長 L 代表為第一段所計算的速度場和濃度場從入口邊界到出口邊界的長度，由於實際微流道的長度不只如此，為了模擬獲得和實驗中相同的管道長度，因此我們的model有作進一步的處理，也將於第四章第一節中詳述。以下在對其基本假設、統御方程式以及邊界條件上作進一步的探討。

2.2 基本假設及統御方程式

為了減化計算故做了以下假設：

1. 流場為穩態、層流及不可壓縮流體。
2. 忽略重力效應。
3. 假設為等溫流場，即流場不隨溫度而改變。
4. 流體的性質(例如:密度、黏滯性)不隨濃度而改變。

5. 混合過程中不會有化學生成。

依據以上的假設，包含質量、動量、及濃度守恆的統御方程式表示如下：

連續方程式-

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2.1)$$

X方向動量方程式-

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (2.2)$$

Y方向動量方程式-

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \quad (2.3)$$

Z方向動量方程式-

$$u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \quad (2.4)$$

其中 μ 為動力黏滯係數 (dynamics viscosity ; $N \cdot s/m^2$) , p 為壓力 ,

$\nu = \mu/\rho$ 為運動黏滯係數 (kinematic viscosity ; m^2/s) 。

濃度(concentration)方程式-

$$u \frac{\partial \rho_i}{\partial x} + v \frac{\partial \rho_i}{\partial y} + w \frac{\partial \rho_i}{\partial z} = D_{AB} \left(\frac{\partial^2 \rho_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \rho_i}{\partial z^2} \right) \quad (2.5)$$

其中 ρ_i 表示成份(species) i 的質量濃度(mass concentration ; kg/m^3) [35] ,

並且為 A, B 所組成的雙混合物(binary Mixture) 故 $i = A, B$, 因此混合

物總質量密度(mass density ; kg/m^3) 為 $\rho = \rho_A + \rho_B$, D_{AB} 為雙擴散係數

(binary diffusion coefficient ; m^2/s) 。

2.3 邊界條件

入口：

在入口條件假設為一均勻流速並且分別給予不同質量濃度成份(species) A 及 B 。

$$\text{在 } x=0, \quad u=\bar{U}, \quad v=0, \quad w=0 \quad (2.6a)$$

$$\text{在 } x=0, \quad y \leq h/2, \quad \rho_i = \rho_A \quad (2.6b)$$

$$\text{在 } x=0, \quad y > h/2, \quad \rho_i = \rho_B \quad (2.6c)$$

出口：

在出口處速度及濃度梯度均為零。

$$\text{在 } x=L, \quad \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \quad (2.7a)$$

$$\text{在 } x=L, \quad \frac{\partial \rho_i}{\partial x} = 0 \quad (2.7b)$$

壁面：

壁面為無滑動(no-slip)條件及濃度梯度為零。

$$\text{在所有壁面,} \quad u=v=w=0, \quad \frac{\partial \rho_i}{\partial n} = 0 \quad (2.8)$$

其中 n 表示為垂直壁面的方向。

2.4 無因次化

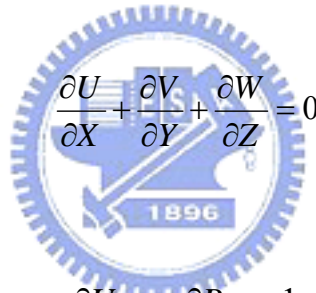
要無因次化前先選擇以下特徵尺寸分別為：入口管道高度 h 、入口

的平均速度 \bar{U} 、壓力 $\rho\bar{U}^2$ 、以及成份 i 的質量濃度使用混合物的總質量密度 ρ ，因此無因次參數群可定義如下：

$$\begin{aligned} X = \frac{x}{h} \quad Y = \frac{y}{h} \quad Z = \frac{z}{h} \quad U = \frac{u}{\bar{U}} \quad V = \frac{v}{\bar{U}} \quad (2.9) \\ W = \frac{w}{\bar{U}} \quad P = \frac{P}{\rho\bar{U}^2} \quad C_i = \frac{\rho_i}{\rho} \quad (i = A, B) \end{aligned}$$

將上列無因次參數群分別代入方程式 (2.2) ~ (2.9) 得到下列的無因次統御方程式及邊界條件；其中 C_i 的定義為成份 i 的質量分數(mass fraction)可用以解析成份 i 的濃度分佈。

連續方程式-



$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} + \frac{\partial W}{\partial Z} = 0 \quad (2.10)$$

X方向動量方程式-

$$U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial Y} + W \frac{\partial U}{\partial Z} = -\frac{\partial P}{\partial X} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Z^2} \right) \quad (2.11)$$

Y方向動量方程式-

$$U \frac{\partial V}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial Y} + W \frac{\partial V}{\partial Z} = -\frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Z^2} \right) \quad (2.12)$$

Z方向動量方程式-

$$U \frac{\partial W}{\partial X} + V \frac{\partial W}{\partial Y} + W \frac{\partial W}{\partial Z} = -\frac{\partial P}{\partial Z} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 W}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial Z^2} \right) \quad (2.13)$$

濃度(concentration)方程式-

$$U \frac{\partial C_i}{\partial X} + V \frac{\partial C_i}{\partial Y} + W \frac{\partial C_i}{\partial Z} = \frac{1}{Pe} \left(\frac{\partial^2 C_i}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial Z^2} \right) \quad (2.14)$$

其中無因次化之後所得的參數分別為：

雷諾數(Reynold number)： $Re = \frac{\rho \bar{U} h}{\mu}$ (*Inertia force/Viscous force*)，代表

在動量的傳輸過程中慣性力和黏滯力的比值。

培克萊特數(Peclet number)： $Pe = \frac{\bar{U} h}{D_{AB}}$ (*Convection/Diffusion*)，代表在

濃度的傳輸過程中對流效應和擴散效應的比值。

對於 Reynold number 和 Peclet number 具有以下的關係：

$$Pe = Re \times Sc \quad (2.15)$$

Sc 為舒密特數(Schmidt Number)： $Sc = \frac{\nu}{D_{AB}}$ (*Viscosity/Diffusivity*)，

代表黏滯係數和擴散係數的比值。

本文的模擬是參考[13]中，水和甘油水的混合，擴散係數大約估計為 $D_{AB} \sim 2.8 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$ ，黏滯係數為 $\nu \sim 0.5583 \text{ cm}^2/\text{s}$ ，所估算的 Sc 為 $Sc \sim 2 \times 10^5$ ，因此所對應的 Pe 和 Re 的關係為：

$$Pe = 2 \times 10^3 \leftrightarrow Re = 0.01$$

$$Pe = 2 \times 10^5 \leftrightarrow Re = 1$$

入口：

$$\text{在 } X=0, \quad U=1, \quad V=0, \quad W=0 \quad (2.16a)$$

$$\text{在 } X=0, Y \leq 1/2, \quad C_A=1, \quad C_B=0 \quad (2.16b)$$

$$\text{在 } X=0, Y > 1/2, \quad C_A=0, \quad C_B=1 \quad (2.16c)$$

出口：

$$\text{在 } X = L/h, \quad \frac{\partial U}{\partial X} = \frac{\partial V}{\partial X} = \frac{\partial W}{\partial X} = 0 \quad (2.17a)$$

$$\text{在 } X = L/h, \quad \frac{\partial C_i}{\partial X} = 0 \quad (i = A, B) \quad (2.17b)$$

壁面：

$$\text{在所有壁面,} \quad U = V = W = 0, \quad \frac{\partial C_i}{\partial n} = 0 \quad (i = A, B) \quad (2.18)$$

2.5 混合指數的定義

在本文所作的模擬中，當流體進入流道之後，經過不同的結構設計時，截面上的液體會產生濃度的改變，為了判別混合的好壞，是以流道的入口為開始，在不同位置的截面上取出濃度分佈加以量化；在此是以 [13] 中來定義混合指標(mixing index)：

$$\text{Mixing index} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (I_i - \bar{I})^2} \quad (2.19)$$

其中 n 表示截面上的元素數目， I_i 為截面上第 i 個元素的濃度， \bar{I} 為截面上平均濃度，在此當混合指標為 0 時表示完全混合，0.5 表示完全不混合。

第三章 數值方法

3.1 離散化傳輸(transport)方程式

數值方法是將統御方程式轉換為代數方程式，以方便數值計算，由第二章的所提的統御方程式，可寫成一個包含了對流項、擴散項及源項的傳輸方程式(3.1)來表示：

$$\text{div}(\rho \bar{V} \phi) = \text{div}(\Gamma \text{grad} \phi) + S_\phi \quad (3.1)$$

其中 ϕ 代表任意的傳輸性質， \bar{V} 為流速， ρ 為流體的密度， Γ 為擴散項的擴散係數， S_ϕ 為源項。

本文是採用有限體積法(Finite-Volume Method)來進行離散，第一步是先將(3.1)式對任意的一微小的控制體積 ΔV 積分，然後再用高斯散度定理(Gauss divergence theorem)將體積分轉換為面積分，表示如下：

$$\oint_S \rho \bar{V} \phi \cdot d\bar{S} = \oint_S \Gamma \nabla \phi \cdot d\bar{S} + \int_{\Delta V} S_\phi dV \quad (3.2)$$

對於面積分以中點定理(midpoint rule)來近似，以下分別說明對流項、擴散項及源項。

3.1.1 對流項(convection term)

(3.2) 式中的等號左邊的對流項用以下方式近似：

$$\oint_S \rho \bar{V} \phi \cdot d\bar{S} \approx \sum_f \rho \bar{V}_f \phi_f \cdot \bar{S}_f = \sum_f F_f^c \quad (3.3)$$

其中 \bar{S}_f 表控制體積面上中點位置的法向量， F_f^c 表通過控制體積面上

的對流通量(convection flux)定義如下：

$$F_f^c \equiv \dot{m}_f \phi_f \quad (3.4)$$

其中 \dot{m}_f 為面上的質量通量(mass flux)。

對流項的處理採用 deferred correction 方法[36]，此方法是將 (3.4) 式寫成上風差分法以及中央差分法的混合型式，表示如下：

$$F_f^c = F_f^{UD} + \gamma \left(F_f^{CD} - F_f^{UD} \right)^{old} \quad (3.5)$$

其中上標UD和CD分別代表具有二階精準的上風差分法(upwind scheme)及一階精準的中央差分法(central scheme)來求得的對流項，如圖3-1所示； γ 為一平衡因子，表示求解對流項時UD以及CD的混合比例，其值介於 0 (純上風差分) 至 1 (純中央差分)；對流項對流的近似表示如下：

$$F_f^c = \max(\dot{m}_f, 0) \phi_p - \min(\dot{m}_f, 0) \phi_c + \gamma \left\{ \dot{m}_f \left[w_f \phi_p + (1 - w_f) \phi_c \right] - \max(\dot{m}_f, 0) \phi_p - \min(\dot{m}_f, 0) \phi_c \right\} \quad (3.6)$$

其中 w_p 為線性插補(linear interpolation)因子。為了使疊代時的係數矩陣具有對角優勢(diagonally dominant)因此是將(3.6)式中等式右邊第二項的上風及中央差分法之和的代入源項中，而等式右邊第一項的上風差分法置於係數矩陣中。

3.1.2 擴散項(diffusion term)

如(3.3)同樣的方法處理擴散項

$$\oint_S \Gamma(\nabla \phi_f) \cdot d\bar{S} \approx \sum_f \Gamma(\nabla \phi_f) \cdot \bar{S}_f = \sum_f F_f^d \quad (3.7)$$

其中 F_f^d 為通過控制體積面上的擴散通量(diffusion flux)定義如下：

$$F_f^d \equiv \Gamma (\nabla \phi_f) \cdot \bar{S}_f \quad (3.8)$$

而擴散項是採用 over-relaxed approach [37] 來處理如圖 3-2 所示， $\bar{\delta}$ 為主格點 P 至相鄰格點 C 的距離向量，並將 (3.8) 式中 \bar{S}_f 寫成 $\bar{S}_f = \bar{d} + (\bar{S}_f - \bar{d})$ ， \bar{d} 為沿著 $\bar{\delta}$ 方向的向量，定義如下：

$$\bar{d} = \frac{|\bar{S}_f|}{\bar{e}_d \cdot \bar{e}_s} \bar{e}_d = \frac{|\bar{S}_f|^2}{\bar{\delta} \cdot \bar{S}_f} \bar{\delta} \quad (3.9)$$

其中 \bar{e}_d 和 \bar{e}_s 為分別沿著 $\bar{\delta}$ 及 \bar{S}_f 方向的單位向量，此 \bar{d} 的值決定數值計算擴散量的大小，對於計算的穩定性有相當大的影響。將 (3.9) 式代入 (3.8) 式中而對流項的近似表示如下：

$$F_f^d = \frac{\Gamma |\bar{S}_f|^2}{\bar{\delta} \cdot \bar{S}_f} (\phi_C - \phi_P) + \Gamma \nabla \phi_f \cdot (\bar{S}_f - \bar{d}) \quad (3.10)$$

在上式中，等式右邊的第二項因具有較大的擴散係數，因此置於源項中有助於疊代時的穩定性，第一項則置於的係數矩陣中。

3.1.3 源項(source term)

對於源項直接做體積分，其近似的型式表示如下：

$$Q = \int_{\Delta V} S_\phi dV \approx S_\phi \Delta V \quad (3.11)$$

在動量方程式中的源項包含著壓力梯度，在此同樣使用高斯散度定理 (Gauss divergence theorem) 來處理，如下所示：

$$\nabla P = \frac{1}{\Delta V} \iint_s P d\bar{S} \approx \frac{1}{\Delta V} \sum_f P_f \bar{S}_f \quad (3.12)$$

其在 \bar{e}_i 方向表示如下：

$$\frac{\partial P}{\partial x_i} = \nabla P \cdot \bar{e}_i = \frac{1}{\Delta V} \sum_f P_f (\bar{S}_f \cdot \bar{e}_i) \quad (3.13)$$

上式中壓力梯度的計算須包含每一控制體積面上的壓力，如是在邊界上的壓力採用以下方式計算：

$$P_b - P_p = \nabla P \cdot \bar{\delta}_b \quad (3.14)$$

其中 P_b 表示在邊界上的壓力， $\bar{\delta}_b$ 為沿格點中心 P 到邊界上中點位置 b 的距離向量如圖3-3所示。將 (3.12) 式寫成下列型式：

$$\nabla P = \frac{1}{\Delta V} \sum_f P_f \bar{S}_f = \frac{1}{\Delta V} \left(P_b \bar{S}_b + \sum_{f \neq b} P_f \bar{S}_f \right) \quad (3.15)$$

將(3.15)式代入(3.14)式中整理可得下式用來計算邊界上的壓力

$$P_b = \frac{\left(P_p + \frac{1}{\Delta V} \sum_f P_f \bar{S}_f \cdot \bar{\delta} \right)}{\left(1 - \frac{1}{\Delta V} \bar{S}_b \cdot \bar{\delta} \right)} \quad (3.16)$$

3.2 代數方程式系統

將前節離散所得之對流項、擴散項、源項合併可得傳輸方程式的離散型式，寫成如下：

$$A_p \phi_p = \sum_c A_c \phi_c + Q \quad (3.17)$$

其中 ϕ_p 及 ϕ_c 分別表示在主格點 P 上以及其鄰近格點 C 上的任意性值，其餘係數分別表示如下：

$$A_p = \sum_c A_c \quad (3.18)$$

$$A_c = \frac{\Gamma_f |\bar{S}_f|^2}{\bar{\delta} \cdot \bar{S}_f} + \max(-\dot{m}_f, 0) \quad (3.19)$$

$$Q = \sum_f \left\{ -\gamma \left\{ m_f \left[w_f \phi_p + (1-w_f) \phi_c \right] - \max(\dot{m}_f, 0) \phi_p - \min(\dot{m}_f, 0) \phi_c \right\} \right\} + \sum_f \left\{ \Gamma \nabla \phi_f \cdot (\bar{S}_f - \bar{d}) \right\} + S_\phi \Delta V \quad (3.20)$$

Q 為源項，包含一些對流項及擴散項其值為前一次的疊代值。

3.3 SIMPLE Algorithm 壓力和速度的偶合關係

在求解速度場時動量方程式必須與連續方程同時求解，這種聯立及非線性的關係在此是用 Patankar [38] 所提出的 SIMPLE(Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation)演算法，其假設速度及壓力具有下面關係：

$$\bar{V}^{**} = \bar{V}^* + \bar{V}' \quad (3.21)$$

$$P^{**} = P^* + P' \quad (3.22)$$

其中 \bar{V}' 和 \bar{P}' 為速度和壓力的修正量， \bar{V}^* 和 P^* 代表每次疊代所得的速度和壓力， \bar{V}^{**} 和 P^{**} 代表修正後的速度及壓力，需滿足連續方程式；利用這種關係，在經由動量方程式及連續方程式來推導出一具有壓力和速度偶合關係的壓力修正方程式(Pressure-Correction Equation)，來求得速度和壓力的修正量，再經一連串的疊代及修正，直到獲得滿足的速度及壓力。以下將說明壓力修正方程式的推導過程。

3.3.1 解動量方程式

由 (3.17) 式將速度 \bar{V} 代入 ϕ 可得離散化的動量方程式如下：

$$A_p \bar{V}_p = \sum_c A_c \bar{V}_c + Q \quad (3.23)$$

將上式中之壓力項自源項中提出，並整理可得格子上的速度表示如下

$$\bar{V}_p = \left(\frac{\sum_c A_c \bar{V}_c + Q'}{A_p} \right) - \left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_p \nabla P_p \quad (3.24)$$

其中 Q' 為不包含壓力之源項。

在此是以類似 Rhie & Chow [39] 所提的線性內插法來計算面上的速度，

首先以類似(3.24)式，格子面上之速度寫成如下：

$$\bar{V}_f = \bar{H}_f - \left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_f \nabla P_f \quad (3.25)$$

其中 $\bar{H}_f = \frac{\sum_c A_c \bar{V}_c + Q'}{A_p}$

而 \bar{H}_f 是由(3.25)式利用面上 f 之相鄰兩格點線性內插而得，表示如下：

$$\bar{V}_f = \bar{\bar{H}}_f - \left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_f \nabla P_f \quad (3.26)$$

其中 $\bar{\bar{H}}_f = \bar{V}_f + \left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_f \nabla P_f$ ，而上標“—”表示由控制體積之中心格點 P 及

另一共面 f 相鄰之 C 格點內插而得，計算如下所示：

$$\bar{\bar{V}}_f = w_p \bar{V}_c + (1 - w_f) \bar{V}_p \quad (3.27)$$

$$\bar{\bar{\nabla}} P_f = w_p P_c + (1 - w_f) P_p \quad (3.28)$$

其中 w_p 為線性插補(linear interpolation)因子；以及係數項 $\left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_f$ 用以下

方法近似：

$$\left(\frac{\Delta V}{A_p}\right)_f = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\Delta V}{A_p}\right)_c + \left(\frac{\Delta V}{A_p}\right)_p \right] \quad (3.29)$$

由(3.26)式面上的質量流率可表示如下

$$\begin{aligned} \dot{m}_f &= \rho_f \bar{V}_f \cdot \bar{S}_f \\ &= \rho_f \bar{V}_f \cdot \bar{S}_f - \rho_f \left(\frac{\Delta V}{A_p}\right)_f \frac{|\bar{S}_f|^2}{\bar{\delta} \cdot \bar{S}_f} \left[(P_c - P_p) - \bar{\nabla} P_f \cdot \bar{\delta} \right] \end{aligned} \quad (3.30)$$

其中 ΔV 表示一微小控制體積的體積， A_p 為(3.15)式中矩陣型式之對角線係數。

3.3.2 解壓力修正方程式

利用(3.21)和(3.22)的關係，首先由 P^* 代入動量方程式中解出速度場 \bar{V}^* ，而此時的速度場 \bar{V}^* 仍不滿足連續方程式，因此壓力及速度需做修正，此時依據 Patankar [38] 所提，速度的修正量用以下方式獲得：

$$\bar{V}_f' = \bar{V}_f^{**} - \bar{V}_f^* = - \left(\frac{\Delta V}{A_p}\right)_f \nabla P_f' \quad (3.31)$$

上式的計算過程中，其中關鍵的一步是將 $\sum_c A_c \bar{V}_c'$ 省略，是將周圍各點的速度修正量忽略，作如此假設是使壓力修正量 P' 對速度修正量 \bar{V}' 的影響變的只有部份的隱含(Semi-Implicit)而非全部隱含；而修正後格子面上的速度表示如下：

$$\bar{V}_f^{**} = \bar{V}_f^* - \left(\frac{\Delta V}{A_p}\right)_f \nabla P_f' \quad (3.32)$$

在此使用一種類似於 SIMPLE 演算法的方式，是將每次疊代所得的壓力

P^* 代入動量方程式中獲得速度 \bar{V}_f^* ，及求得質量流率 \dot{m}_f^* ，由於並不滿足連續方程式，在此是將質量流率做一修正，其關係如下：

$$\dot{m}_f^{**} = \dot{m}_f^* + \dot{m}_f' \quad (3.33)$$

其中 \dot{m}_f' 為質量流率的修正量。

將(3.31)式代入(3.33)整理可得

$$\begin{aligned} \dot{m}_f^{**} &= \dot{m}_f^* - \rho_f \left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_f \nabla P_f' \cdot \bar{S}_f \\ &= \dot{m}_f^* - \rho_f \left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_f \frac{|\bar{S}_f|^2}{\bar{\delta} \cdot \bar{S}_f} (P_C' - P_p') - \rho_f \left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_f \nabla P_f' (\bar{S}_f - \bar{d}) \end{aligned} \quad (3.34)$$

令修正後之質量流率滿足連續方程式即 $\sum_f \dot{m}_f^{**} = 0$ 並將其代入上式，則

可得壓力修正方程式(Pressure-Correction Equation)表示如下：

$$A_p P_p' = \sum_f A_c P_c' + S_{p1} + S_{p2} \quad (3.35)$$

其中

$$A_c = \rho_f \left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_f \frac{|\bar{S}_f|^2}{\bar{\delta} \cdot \bar{S}_f} \quad (3.36)$$

$$A_p = \sum_f A_c \quad (3.37)$$

$$S_{p1} = -\sum_f \dot{m}_f^* \quad (3.38)$$

$$S_{p2} = \sum_f \rho_f \left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_f \nabla P_f' (\bar{S}_f - \bar{d}) \quad (3.39)$$

由以上可求得壓力之修正量 P' ，修正步驟是採用連續修正(successive correction)[36]來近似，且採用兩步驟的修正，第一步是只考慮含 S_{p1} 部分求得第一次壓力修正量 $P'^{(1)}$

$$A_p P_p'^{(1)} = \sum_f A_c P_c'^{(1)} + S_{p1} \quad (3.40)$$

第二步再以所求得之壓力修正量 $P'^{(1)}$ 計算部分 S_{p2} 求得第二次壓力修正量 $P'^{(2)}$

$$A_p P_p'^{(2)} = \sum_f A_c P_c'^{(2)} + S_{p2}^{(1)} \quad (3.41)$$

其中

$$S_{p2}^{(1)} = \sum_f \rho_f \left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_f \nabla P_f'^{(1)} (\bar{S}_f - \bar{d}) \quad (3.42)$$

類似上述的第二步驟，若重複疊代則可求得更高階的壓力修正量，一般而言使用連續兩步的修正就已足夠；求得壓力修正量後速度、壓力、質量流率即可獲得修正如下：

$$\bar{V}_p^{**} = \bar{V}_p^* - \left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_f \left(\nabla P_p'^{(1)} + \nabla P_p'^{(2)} \right) \quad (3.43)$$

$$P_p^{**} = P_p^* + P_p'^{(1)} + P_p'^{(2)} \quad (3.44)$$

$$\dot{m}_f^{**} = \dot{m}_f^* - \rho_f \left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_f \frac{|\bar{S}_f|^2}{\bar{\delta} \cdot \bar{S}_f} (P_c'^{(1)} - P_p'^{(2)}) \quad (3.45)$$

$$\dot{m}_f^{**} = \dot{m}_f^* - \rho_f \left(\frac{\Delta V}{A_p} \right)_f \nabla P_f'^{(2)} (\bar{S}_f - \bar{d}) \quad (3.46)$$

3.4 鬆弛因子(under-relaxation factor)

為使疊代的過程中，減緩變數更新的過程，使每次疊代能穩定並且收斂，在此引入一鬆弛因子 α (under-relaxation factor)[36]其值介於 0~1 之間，處理如下：

$$\phi_p^{new} = \alpha \phi_p^{calc} + (1-\alpha) \phi_p^{old} \quad (3.47)$$

其中 ϕ_p^{old} 為前一次的疊代值， ϕ_p^{calc} 為當前所求得的疊代值， ϕ_p^{new} 為新的疊代值。將(3.47)式代入到(3.17)式中修正後的代數方程式表示如下：

$$\frac{A_p}{\alpha} \phi_p^{new} = \sum_f A_c \phi_c^{new} + Q + \frac{1-\alpha}{\alpha} A_p \phi_p^{old} \quad (3.48)$$

其中當 α 為1時新的疊代值等於當前所求得的疊代值，不具有鬆弛效應。

3.5 解題步驟

所有解題步驟敘述如下：

1. 先給予一初始壓力，代入動量方程式中解出 \bar{v}^* 。
2. 計算出面上的質量流率 m_f^* 。
3. 修正質量流率使滿足連續方程式，並求得壓力修正方程式，解出壓力修正量 P' 。
4. 由壓力修正量 P' 修正壓力 P^{**} 、速度 \bar{v}^{**} 、及質量流率 m_f^{**} 。
5. 將修正後的壓力 P^{**} 及速度 \bar{v}^{**} 設為初值，重覆步驟 2 到 5 直到獲得收斂解。
6. 求解濃度場。

代數方程式的求解方式

一般結構性網格之係數矩陣為只具有數個對角線的 banded matrix，而使用非結構性網格之係數矩陣不具此性質，因此一般常用之 line solvers 及

Stone's SIP 皆不適用 point solvers 雖可用於解 unbanded matrix，但其缺點為收斂速度太慢。在此採用 preconditioned conjugate gradient methods，對於壓力修正方程式，其係數矩陣具對稱性質，因而採 ICCG(Incomplete Cholesky Conjugate Gradients)法[40]，而動量方程式因其係數矩陣不具對稱性質，因此採 BICG(Biconjugate Gradients)法[41]，濃度方程式之係數矩陣為 banded matrix 因而採 GS(Gauss-Seidal)法。



第四章 結果與討論

4.1 簡介

在本研究所做的模擬尺寸上為 μm 等級，由於尺寸的大小及 size ratio 的關係，使的我們的計算 model 必須作特別的簡化及處理，而一般微流道截面長度大約是 $100 \mu m$ 左右，管道長度大約是在 $3\sim 5 cm$ ，如果依照 size ratio 將網格全部建立的話，其網格數最少上百萬個，以有限的時間當中幾乎是不可能跑的出來；因此由 [42] 中認為 SRM 及 SHM 具有週期性幾何外型之特性，為了減少格點數目過多造成計算的耗時，以 SRM 為例，是以 10 個凹槽為一週期結構，首先將計算到收斂後出口的速度再代回到入口作為邊界條件，再計算到收斂，重複此步驟獲得週期性速度場，而在解濃度場方面就是利用這週期性的速度分佈，並也將濃度做週期性的方式分段去進行計算，以獲得下游的濃度分佈；本文的改變首先將凹槽改變成 12 個，以同 [42] 中的條件計算流場至收斂後，我們取是第 7 個凹槽為基準，和其他凹槽之間 A~E 的相對位置(如圖 4-1 所示)的速度 u 、 v 和 w 做一均方根誤差的比較，分別於表 4-1、4-2 和 4-3 中所示，結果可看出在第 3 個凹槽到第 10 個溝槽之間相對位置的相對誤差低於百分之一，因此我們判定在管道中間部分 8 個凹槽之間具有週期性的速度分佈；對於濃度的計算則是假設速度具有此週期性的分佈，因此截取此段之間的速度場，再以週期性的方式來計算下游的濃度分佈(如圖 4-2 所示)。對於不同

週期結構形狀的流道，我們認為截取的部分離出口和入口最少要在兩個週期的結構以上，如此應該獲得接近週期性的速度分佈，依據以上方式，本論文對於之後於各種形狀的流道中都是將管道拉長，截取管道中間一段週期性速度場作濃度場的計算，在以出口代入口的方式求得下游各段的濃度分佈。

4.2 數值方法的驗證

首先為了判定本數值方法能運用於微流道的模擬獲得正確的物理現象，驗證的方式以格點測試以及不同 Peclet number 和實驗的結果驗證。

4.2.1 格點測試與實驗結果的比較

為了使內部的格點數及網格大小的劃分，不至於影響到數值模擬結果的正確性，首先藉由格點測試的工作，來尋求有限的電腦資源中網格分佈的最佳化。對於格點的測試是以 [13] 中的直形斜凹槽(SRM)及人字形凹槽(SHM)混合器為例，其凹槽深度 G_d 為 $0.44h$ ($30.6\mu m$)，凹槽寬度 G_w 為 $0.72h$ ($50\mu m$) 尺寸與 [13] 相同，分別測試在 $Pe = 2 \times 10^5$ 的條件下網格疏密對混合指數結果的影響；在這裡特別注意到，對流項scheme所使用的混合因子 γ 速度場為 1 (純CD)，濃度場為 0.9 (CD所佔的比例為 90% UD所佔的比例為 10%)，分別以 A、B、C、D 四組網格測試 SRM 及 SHM，網格的分佈於表4-2及4-3中以如此的加密方式，而格點最密的區域主要位於流道內凹槽的部份，主要是此處為物理量梯度變化最顯著的

區域，測試結果於圖4-3及4-4所示，而從計算的結果發現，在 C 組與 D 組的網格對於混合指數並沒有太大的變化，因此我們以 C 組網格做為往後模擬的參考依據，圖4-5 中我們取SHM每一週期之後的截面濃度和 [13] 實驗結果的比較，其濃度分佈的形態相當接近。

4.2.2 不同 Peclet number 和實驗結果的比較

在[13]中提到混合機制主要是由 *Peclet number* (Pe) 來主導， Pe 為對流和擴散效應的比值，在擴散係數為定值的情形之下，對於 Pe 的變動也代表著雷諾數 Re 的改變，圖 4-6 為 SHM 在 $Pe = 2 \times 10^3$ 的條件下和 [13]中實驗結果的比較，從我們計算的結果發現到濃度場 $\gamma = 0.5$ 時與實驗的結果較接近，我們認為由於在較低的 Pe 時擴散效應較為強烈，因此 $\gamma = 0.5$ 時 UD 的比重較高，會產生一些數值擴散(numerical diffusion)的效應，使得我們計算的結果和實驗較接近，圖 4-7 為 $Pe = 2 \times 10^4$ 時發現在 $\gamma = 0.8$ 與實驗的結果較接近。

圖 4-8 及 圖 4-9 為 SHM 和 SRM 於不同 Pe 的比較，從圖中發現到， $Pe = 2 \times 10^3$ 時混合指數較佳，是因為由於較低的 Pe 之下流體在低雷諾數($Re = 0.01$)時，由於兩流體間的介面流速較慢，使得兩流體間接觸的時間增加，提升了分子擴散作用，混合效率會有所提升，相對於 $Pe = 2 \times 10^5$ 時隨著 Pe 的提升，對流效應的增加反而混合效果變差，因此在對流效應較強烈的流場中，就必須靠著混沌移流(Chaotic advection)的現象來達到混合的方法。

4.2 直形斜凹槽混合器(SRM)性能分析

在此首先對於SRM作一基本的分析，以便往後其他型式的比較，由先前 $Pe = 2 \times 10^5$ 的結果，圖4-10為 Y-Z截面觀測位置示意圖，首先在圖4-11為取位置A、G和F截面的速度向量觀察，可以發現由於底部斜凹槽的構造，使得流體被凹槽的引導之後形成一旋渦，帶動使主流道中形成成橫向的速度，圖4-12是取第六至第七個凹槽一個週期之間 B、C、D、E 位置的截面向量圖，從中圖發現速度分佈於凹槽底部較為密集，主流道中橫向的速度為SRM中主要的流動型態，圖4-13觀察Y-Z截面上的濃度分佈可清楚發現，因為這種橫向的速度使得流體產生扭曲和拉長，流體間的接觸面積也因此增加，減少了擴散所需的距離，這就是所謂的混沌移流(Chaotic advection)現象，由圖4-14及4-15中由上游至下游觀察流體，像是不斷的被螺旋狀的攪動一樣，造成混合的主要機制。

對於混沌移流(Chaotic advection)現象的產生，基本概念為利用流道外形的改變來產生此效應，之所以被稱為被動式混合器的一種，因此對於外型參數的改變對混合指數也有一定的影響；以下再對於凹槽深度、凹槽寬度及凹槽傾斜角度(如圖4-16)外型參數的改變加以比較，且固定 $Pe = 2 \times 10^5$ 分別討論。

1. 凹槽深度 G_d 對混合效果的影響

分別增加及減少凹槽的深度尺寸為 $0.86h$ 及 $0.2h$ 來比較，圖4-17為分別取

F 及 G 截面的速度向量，可以發現 $G_d = 0.86h$ 時位於凹槽部分速度場較為強烈，圖4-18及圖4-19為比較不同凹槽深度於 F 及 G 截面中心位置的橫向速度的比較，可發現到凹槽越深橫向速度越強烈，達到混沌移流的目的提升，表示著流體界面被快速的拉長，增加了流體間的接觸面積，減少了擴散所需的距離；圖4-20、4-21 及4-22為 $G_w = 0.2h$ 時的截面濃度分佈，圖4-23為 $G_d = 0.86h$ 時在1cm長度以前的截面濃度分佈變化情形，由當中比較發現凹槽深度為 $0.86h$ 於1cm長度就可以達到相當均勻的混合，由於凹槽加深兩不同流體的介面扭曲和拉長， $G_d = 0.86h$ 時最為強烈，圖4-24混合指數來比較發現較深的凹槽為 $0.86h$ 時混合指數最好，而較淺的凹槽 $0.2h$ 所得的混合指數較差。

2. 凹槽寬度 G_w 對混合指數的影響

再分別以改變凹槽的寬度為 $0.36h$ 及 $1.44h$ 來比較其混合的好壞，圖4-25 為分別取位置 F 及 G 截面速度向量，明顯看出凹槽越寬時為於凹槽的流體速度分佈較強，從圖 4-26 及 圖 4-27 分別比較 F 及 G 截面中心位置的橫向速度 V 大小可發現，凹槽越寬橫向速度越強烈，增加了管道中的混合機制，圖 4-28、4-29 及 4-30 為凹槽的寬度為 $0.36h$ 時往下游觀察的截面濃度分佈變化情形，明顯發現混合到達 3cm 處還不是很理想，紅色(1)和藍色(0)部分還是相當分明，圖 4-31 為觀察較寬的凹槽 $1.44h$ 時的截面濃度分佈，由圖中發現只 1cm 的距離就可達到均勻的混合，較寬的凹槽相當的利於兩流體介面間持續的扭曲變化，達到混沌對流的提升，圖 4-32

從混合指數比較發現較寬的凹槽 $0.86h$ 時最好，而較窄的凹槽 $0.36h$ 所得的較差。

3. 凹槽傾斜角度 α 對混合指數的影響

分別再以 $\alpha = 30^\circ$ 、 $\alpha = 60^\circ$ 、 $\alpha = 75^\circ$ 三種凹槽傾斜角度來加以比較，圖 4-33 為分別取位置 F 及 G 截面速度向量，發現凹槽傾斜角於 $\alpha = 60^\circ$ 時凹槽底部速度較強，從圖 4-34 及圖 4-35 為比較不同凹槽傾斜角時位於 F 及 G 截面中心位置的橫向速度 V ，發現到 $\alpha = 60^\circ$ 和 $\alpha = 45^\circ$ 時位於凹槽部份的速度變化較劇烈，而從圖 4-35 中明顯看出 $\alpha = 60^\circ$ 時橫向速度最為強烈，圖 4-36、4-37、4-38 為 $\alpha = 30^\circ$ 從上游至下游的截面濃度變化情形，圖 4-39 及圖 4-40 為傾斜角度 $\alpha = 60^\circ$ 的截面濃度變化情形，圖 4-41、4-42、4-43 為 $\alpha = 75^\circ$ 的截面濃度變化情形，從以上的圖中可比較發現，在 $\alpha = 60^\circ$ 時於 2cm 就可達到均勻的混合，而在 $\alpha = 30^\circ$ 及 $\alpha = 75^\circ$ 時流體不易產生扭曲，達到混合的效果，從圖 4-44 的混合指數比較發現，太小及太大的凹槽傾角， $\alpha = 30^\circ$ 及 $\alpha = 75^\circ$ 時所得的混合結果較較差， 60° 和 45° 在 1cm 以前結果幾乎差不多，而在 1cm 之後有些微的變好，但並沒有明顯的變好。

4.3 雙邊斜凹槽混合器(Double SRM)性能分析

我們將管道設計成上下壁斜凹槽的結構如圖 4-45 示意圖所示，圖 4-46 為觀察位置 A 的截面流場型態，從圖中發現上下壁的斜凹槽可產生

兩個機制的橫向速度，圖 4-47 是分別取 B~E 位置的截面速度場，從圖中發現，位於溝槽區域流體皆產生由右向左的流動，上方溝槽翻轉向下進入主流道，而下方溝槽則是翻轉而上流入，形成一逆時針與順時針旋轉的流場型態，比起 SRM 流體被攪動更為加速，圖 4-48 為 1cm 距離之前截面濃度分佈的變化情形，從圖中看出受到上下凹槽的作用，翻轉進入主流道中，產生伸展(folding)及擠壓的作用，帶動濃度形成上下對稱的分佈現象，產生了混沌移流的現象，流體扭曲情形和流體間的接觸面積也比 SRM 更為增加，可明顯看出於 1cm 的距離就可達到均勻的混合，圖 4-49 為 1~2cm 距離之間截面濃度分佈的變化情形，圖 4-50 為和 SRM 的混合指數比較，發現 Double SRM 的混合效果較佳。

圖 4-51 中我們將 Double SRM 及先前的凹槽加深及加寬的結果加以比較，同樣為 $Pe = 2 \times 10^5$ 條件下，比較發現凹槽加深及加寬的結果在 0.7cm 的長度以後，混合指數有稍微好一些，但沒有明顯的差距，在此我們認為凹槽加深及加寬或者是上下壁都有斜凹槽，均可產生混沌移流的效應，增加混合的機制。

4.4 人字形凹槽混合器(SHM)性能分析

圖 4-52 為人字形凹槽混合器 SHM 一個週期結構的示意圖，一週期的長度為 0.2cm，其中具 12 個人字形凹槽；對於 SHM 的流場特性，圖 4-53 為取在 A~E 位置的 Y-Z 截面速度場，由圖中可以發現，由於因為底部人

字型凹槽不對稱的關係，將流場可分為兩區，首先在左邊的區域 A~D 截面，流體被下方凹槽帶動，形成兩個逆向旋轉的流動型態，之後兩股流體在 $Y=1.92$ 處撞擊，可由 C 及 D 剖面位置明顯看出，而在經過半個週期之後兩股流體變成在 $Y=0.96$ 處撞擊，可由 G 及 H 剖面位置明顯看出，造成在一週期間相互交換流動；圖 4-54 為從入口到 1cm 距離之間取在 C 及 G 位置觀察的濃度分佈，可發現，在一週期之間底部凹槽不對稱的關係產生撞擊介面位置的改變使得左右的濃度相互交換，所造成的混沌移流的效應，增加了兩流體間的分子擴散，造成混合的效果，圖 4-55 中從上視觀察混合情形，發現在超過 1cm (第 5 段) 之後混合就已相當的不錯。



4.5 傾斜阻塊人字形凹槽混合器(OBSHM)性能分析

我們於 SHM 管道中以週期的方式放置傾斜阻塊稱為 OBSHM，放置的位置如圖 4-56 所示，圖 4-57 是取主流道中心截面的速度場，從圖中發現到流體被阻塊擠壓速度產生劇烈的變化，圖 4-58 是 A~S 位置 Y-Z 截面速度場，流場型態不同於 SHM 因受傾斜阻塊的關係，已不受底部凹槽的影響，圖 4-59 為取 C、G、I 及 J 四個位置的 Y-Z 截面的濃度分佈，明顯看出混合的機制只受到兩旁阻塊造成的擠壓效應，不同於 SHM 利用不對稱的凹槽來造成兩邊濃度相互交換形態，底部的凹槽像是完全失去功能，圖 4-60 為主流道中心截面濃度分佈，從圖中看出在超過 1cm (第 5 段) 之後混合還是有些許的不均勻，我們認為由於在較高 Pe 時因對流效應較為

強烈，而流場已不受底部溝槽的影響，流場無法產生特殊的混沌移流效應，兩種流體無法有效的擴散，反而導致混合的不均勻，圖 4-61 為 $Pe = 2 \times 10^3$ 的條件下和 SHM 的截面濃度分佈比較，從圖中看出由於在低 Pe 之下，擴散效應較為強烈的流場中，兩流體間的介面流速較慢，凹槽加阻塊可使兩流體間接觸的面積大為增加，增加了擴散的機制，可獲得較好的混合結果，圖 4-62 為 $Pe = 2 \times 10^5$ 的條件下和 SHM 混合指數的比較，從圖中可發現到在 0.8cm 之後 OBSHM 的混合指數不及於 SHM，圖 4-63 為在 $Pe = 2 \times 10^3$ 時 SHM 和 OBSHM 的混合指數的比較，從圖中明顯看出 OBSHM 的混合指數勝過 SHM。

4.6 阻塊結構混合器性能分析

於管道內以週期性的方式上下交錯的放置阻塊，由於不同的阻礙物提供了液體不同的阻力，流體在通過時會產生壓擠與拉伸的效果，增加液體間的接觸面積達到混合的效果；為了探討混合的好壞，分別對於四種型式的阻塊如圖4-64中 Type 1、Type 2、Type 3、Type 4 所示，加以比較作各別討論，並和之前的SRM及SHM作一比較；圖中以管道中間是虛線部分的速度做為濃度場的計算範圍。

首先模擬 $Pe = 2 \times 10^5$ 時，Type 1 凸塊的高度及寬度均為入口寬度的一半 $w/2$ ($100\mu\text{m}$)，高寬比為 1；圖4-65為中心位置的 X-Y 截面速度向量圖，可看出凸塊上方的速度較大，由於截面積縮小的關係，圖4-66

和圖4-67是從上游至下游的 X-Y 截面濃度分佈圖，觀察可發現，紅色與藍色兩種流體開始有混合的現象，在圖4-66中達到1cm時還不是相當的明顯，圖4-67中達到3cm時還是無法到達均勻的分佈，圖4-68是不同 X 位置觀察 Y-Z 截面內部的濃度分析情形，混合的現象是發生在管道中心處彼此相互的侵佔，中心處濃度接近0.5逐漸擴散，左右對稱，從內部觀察到達3cm時還是無法到達均勻的混合。

Type 2 是將 Type 1 的阻塊改變成傾斜 45° 時的情形下，使得流體產生另一種混合的機制，圖 4-69 是 Z 方向中心位置的 X-Y 截面速度場，從圖中發現與先前不同的除了在凸塊的上方速度變化較劇烈外，由於凸塊傾斜使得凸塊之間的距離縮小，Y 方向的速度產生了劇烈的變化，圖 4-70 和圖 4-71 分別比較 Type 1 和 Type 2 在中心截面的 u 和 v 的速度 contour，由圖中發現 Type 2 位於凸塊上方的 u 的速度較大，壓擠效果較強烈，而傾斜的效果使得凸塊之間的 Y 方向速度比 Type 1 更為強烈，增加了一壓擠的效果，縮短了分子擴散的距離；圖 4-72 是從入口到 1cm 之間的中心位置濃度分佈，從圖中看出混合現象比起 Type 1 明顯改善，圖 4-73 為到達 2cm 處的截面濃度分佈，圖中發現幾乎達到均勻的混合，圖 4-74 觀察不同 X 位置截面濃度分佈，發現在 1.8cm 時內部就可達到均勻的混合。

Type 3 和 Type 4 是將凸塊的寬度變窄改成 Type 2 和 Type 1 的一半為 $w/4$ ($50\mu m$) 如圖 4-64 中所示；首先於 Type 3 中，圖 4-75 是取管道內中心位置的 X-Y 截面向量圖，發現於凸塊上方及凸塊之間速度相當的密


集，所以流體受到更多次數的壓縮效果增進混合，圖 4-76 是於入口到 1cm 之間的截面濃度分佈，從圖中看出幾乎一半的距離就達到均勻的混合，從圖 4-77 為 Y-Z 截面也可看出，在 $X=0.6\text{cm}$ 左右內部就可達均勻的混合；在 Type 4 中，圖 4-78 是取中心位置的 X-Y 截面向量圖，發現由於凸塊改變成傾斜使得凸塊和凸塊之間變的非常的狹小，速度變化相當劇烈，藉此來所短擴散的距離，形成混合的機制，圖 4-79 和 圖 4-80 分別比較 Type 3 和 Type 4 在中心截面的 u 和 v 的速度 contour，從圖中發現 Type 4 由於凸塊寬度變小了，使得在凸塊上方並沒有劇烈的壓擠效果 u 的速度並沒有太大的變化，而傾斜的效果使得凸塊之間狹小的部分產生了一股強烈的速度，只有在此處液體被劇烈壓縮，形成混合的機制，圖 4-81 是中心截面的濃度分佈，及圖 4-82 為在不同 X 位置截面的混合情形，從圖中發現在下游 0.6cm 處左右就可達到均勻混合，圖 4-83 比較四種型式的凸塊於不同 X 位置的濃度分佈圖，由圖中看出 Type3 及 Type 4 於 $X=0.6\text{cm}$ 時曲線的斜率就以相當的小，此時內部的濃度已經達到均勻的分佈，而 Type 2 到了 1.8cm 的長度才達到均勻的分佈，Type 1 效果最差。

於 $Pe = 2 \times 10^3$ 時，圖 4-84 為四種型式阻塊的中心截面濃度分佈，由於在較低的 Pe ，代表著流速相當緩慢 ($Re = 0.01$)，從圖中可看出流體在第一段混合就已相當的均勻，在低速的情況下流動充分的達到擴散效果，圖 4-85 為四種阻塊於不同 X 位置的濃度分佈圖，從圖中可看出在 0.1cm 時 Type1 及 Type 2 還無法到達均勻的混合，在到達 0.4cm 的時候

四種型式的阻塊均以到達均勻的混合，濃度分佈的曲線斜率已變成水平，內部均達 0.5。圖 4-86 為在 $Pe = 2 \times 10^5$ 和先前的 SRM、SHM 及 OBSHM 的混合指數來比較，圖中發現到，在 Type3 及 Type 4 中凸塊寬度變小，混合指數明顯變好，勝過 SRM、SHM 及 OBSHM，而在 Type1 及 Type 2 較寬的凸塊下，傾斜的效果使得混合指數明顯變好，卻不及於 SHM，圖 4-87 中為在 $Pe = 2 \times 10^3$ 的情形下，發現到四種型式的混合效果均勝過 SRM、SHM 及 OBSHM。

4.7 各型態混合器壓降比較

首先定義一截面的平均壓力 \bar{P} 表示如下：



$$\bar{P} = \frac{\sum_{i=1}^n P_i A_i}{\sum_{i=1}^n A_i}$$

其中 A_i 及 P_i 分別代表該截面上第 i 個格點的面積及壓力，在此注意到 P 為已無因次化的壓力。圖 4-88 及圖 4-89 為 SRM 和 SHM 在不同雷諾數的情形下，管道中相對於入口壓力的壓力降曲線，的從圖中明顯看出當雷諾數越大時壓力降越小，這是因為由無因次的壓力定義中 $P = p / \rho \bar{U}^2$ 平均流速的平方和無因次壓力成反比關係，因此雷諾數越小時流速越小，管道中所得的相對於入口的壓力會越大的關係；圖 4-90~4-93 分別為在 $Re = 1$ 情形下，單邊和雙邊凹槽以及凹槽深度、寬度、傾角改變時和壓降的關係，圖

4-94和圖4-95分別為在 $Re = 1$ 及 $Re = 0.01$ 的情形下，SRM、SHM 及 OBSHM 和四種型式阻塊跟壓降的關係，分別將以上的壓降曲線，以壓力梯度 $\Delta\bar{P}/L$ 來表示，其中 L 為第一段速度場所計算model長度，各型態的混合器整理於表4-6及表4-7中。表4-8及表4-9為換算成 N/m^3 單位的壓力梯度，分別乘上先前所選的無因次化參數，分別為入口管道高度 h 、壓力 $\rho\bar{U}^2$ 所得的結果。



第五章 結論

本文主要利用數值模擬計算分析單邊斜凹槽(SRM)、雙邊斜凹槽(Double SRM)、人字形凹槽(SHM)、傾斜阻塊人字形凹槽(OBSHM)與阻塊(Block)結構等微混合器，探討被動式微混合器之流場現象與混合效果，並且透過多種不同情況的外型參數下來探討其中的混合結果，經由我們的模擬結果發現以下結論。

1. 在本文中所有的混合器型態中， $Pe = 2 \times 10^3$ 的混合效率均比 $Pe = 2 \times 10^5$ 還好，這是由於 $Pe = 2 \times 10^3$ 相對於 $Re = 0.01$ 低雷諾數的情形下，兩流體間流速較慢，較能充分的達到擴散作用，混合效率會有所提升，而在 $Pe = 2 \times 10^5$ 相對於 $Re = 1$ 的情形下，兩流體間流速較快，不利於擴散效應的產生，故混合效率較差，這點在相關的文獻中，趨勢均相同。
2. 在SRM中，流場受到結構的影響而產生橫向的流動形態，進而以混沌移流的方式，拉伸並扭曲流體介面增進粒子間的擴散；並且我們發現，若較深的凹槽深度、較寬的凹槽寬度，其混合效果會越好，而對太大或太小的的凹槽傾角，其混合效果會越差。
3. 在管道上壁面以交錯排列之凹槽雖可增加混合效率，但混合結果相當於加深或加寬凹槽所得到的混合效果。
4. 如在人字型凹槽之間以週期的方式放入阻塊時發現，在 $Pe = 2 \times 10^5$, $Re = 1$ 時由於流速較快，在此種構造當中(OBSHM)，兩流體

無法有效的擴散，混合效率無法提升；對於 $Pe = 2 \times 10^3$, $Re = 0.01$ 時，兩流體間的介面流速較慢，使得兩流體間接觸的時間增加，提升了分子擴散作用，所以混合效率 OBSHM 會比 SHM 好。

5. 在流道中單純只有阻塊時，將阻塊傾斜時所得的混合效率較佳，在 $Pe = 2 \times 10^5$ 時凸塊 Type 3 及 Type 4 的混合效率均勝過 SRM、SHM 及 OBSHM，在 $Pe = 2 \times 10^3$ 時四種型式的阻塊均勝過 SRM、SHM 及 OBSHM。

