

以有限元素分析法軟體優化化工單元

多功能材料實驗室

-康敦彥團隊

簡介

多數工程設備（如：壓縮機、幫浦、反應器、熱交換器等）的操作原理皆可用輸送現象(transport phenomena)來描述。輸送現象包含了質量輸送、動量輸送（即：流體動力學）、能量輸送（即：熱傳學），這些輸送現象可用下列四個方程式分別描述：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \vec{v} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{D \vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} + \rho \vec{g} \quad (2)$$

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = k \nabla^2 T + Q \quad (3)$$

$$\rho \frac{DC_A}{Dt} = \rho D_{AB} \nabla^2 C_A + r_A \quad (4)$$

其中 ρ 為流體密度、 t 為時間、 \vec{v} 為流體速度、 μ 為流體黏度、 \vec{g} 為重力加速度、 T 為溫度、 C_p 為流體比熱容、 k 為熱傳導係數、 Q 為系統吸放熱、 C_A 為A物質濃度、 D_{AB} 為A物質相對於B的擴散係數、 r_A 為A的反應速率。

上述方程式中，(1)和(4)描述質量平衡、(2)描述動量平衡、(3)描述能量平衡。若同時求解上述四條方程式，則可以得到流體速度、溫度、濃度隨在系統中隨著時間的分佈情形。從流體的速度、溫度、濃度資訊中，我們可以定量計算出某一工程設備的操作效能。

然而，上述方程式皆為偏微分方程式，在真實系統的複雜幾何形狀中幾乎不可能求出解析解，僅能得到數值解。隨著電腦運算技術的演進，已經有許多針對這些輸送現象方程式求解的套裝軟體工具，如：ANSYS、COMSOL Multiphysics、Abaqus 等等(Figure 1)。



Figure 1. 三種常見的輸送現象求解軟體。

這些套裝軟體皆包含了下列功能：

1. 讓使用者繪製模擬巨觀設備的幾何形狀。
2. 讓使用者決定一個或多個要求解的輸送現象偏微分方程式。
3. 讓使用者能夠輸入流體的性質參數。
4. 讓使用者能夠設定數值方法求解的網格與求解器參數。
5. 能夠視覺化數值求解之後的結果。

在不同的數值方法軟體中，本實驗團隊長期使用 COMSOL Multiphysics 這套軟體。相較於其他功能相近的軟體，COMSOL Multiphysics 擁有友善的使用者界面與容易進行不同物理現象耦合的優點。

然而，在進行 COMSOL 運算時，需要的運算資源(CPU 與記憶體)也相當龐大。若利用一般桌上型個人電腦來運算 COMSOL 建立的一個 3D 流體力學模型，往往需要數天到一個禮拜的運算時間，大幅限制了研究的進度。因此我們希望申請台大計算機中心的高效能運算資源來進行 COMSOL 運算，以縮減運算所需時間、加速本團隊的研究進展。

問題描述與擬採用方法

我們預期利用台大計算機中心的高效能運算資源與 COMSOL 軟體進行三項研究工作：1)實驗室排氣設備的優化、2)薄膜材料內部質量輸送之探討、3)工業級化學反應器的設計與放大、。針對此三項研究主題之問題描述與研究方法分述如下。

主題一：實驗室排氣設備的優化

化學實驗室常用的排氣設備為排煙櫃與抽氣式藥品櫃，這些設備的抽氣效能直

接影響操作人員的工作安全。排煙櫃或是抽氣式藥品櫃的運作原理，為在一空間內製造向外排氣的流場，將空間內之化學藥品的蒸氣隨著流場而排除。在這個工程設計的問題中，流場的進出方向與流場在空間內的分佈極為重要。在過去的研究當中，我們嘗試了多種不同的排煙櫃設計方式，如 Figure 2 所示。

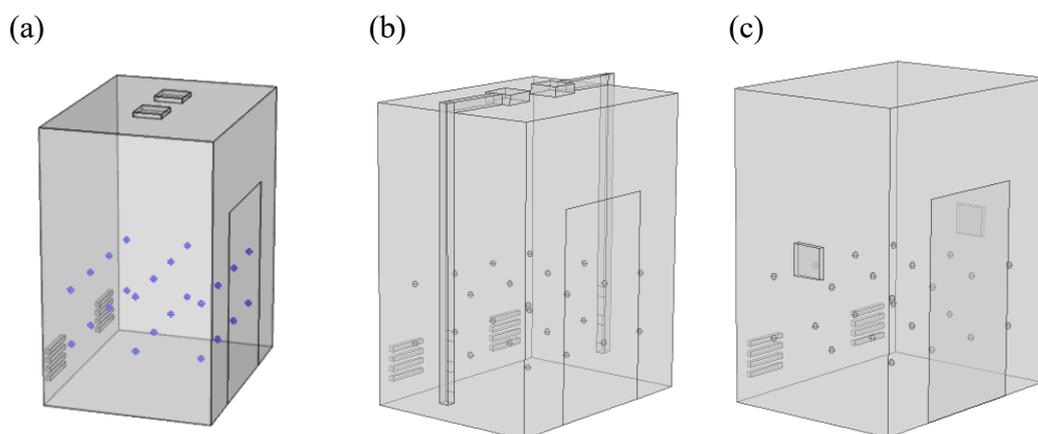


Figure 2. 三種不同排風口設計的排煙櫃。

Figure 2 中三種不同排煙櫃設計的排氣口設計有顯著的不同。圖中排氣櫃內部的小圓點代表了實驗操作中有機蒸氣的來源，我們利用 COMSOL 來模擬經過一段時間之後，三種排煙櫃內部的有機蒸氣排除情形，藉此比較不同排煙櫃設計的優劣。

在排煙櫃操作 60 秒之後，內部濃度分佈如 Figure 3 所示：

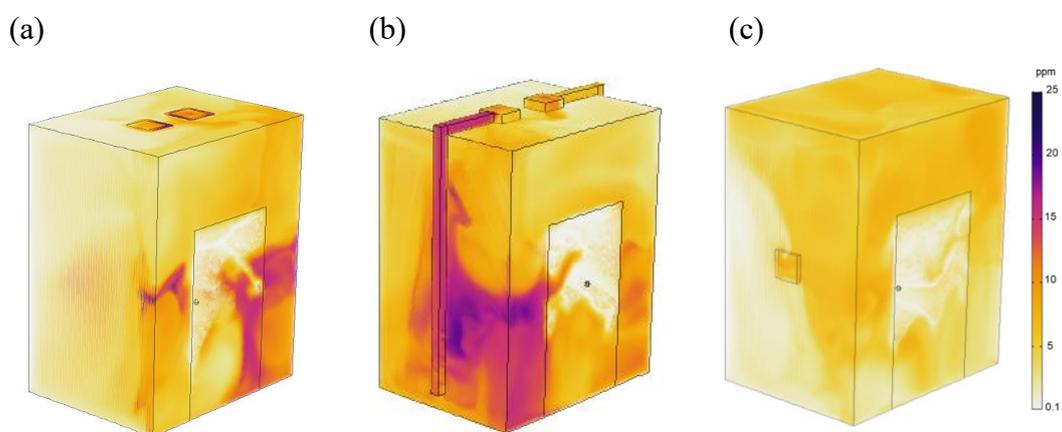


Figure 3. 在 60 秒操作之後，三種不同排風口設計的排煙櫃內部的濃度分佈情形。

從 Figure 3 中我們可看出三種排煙櫃設計內部的有機蒸氣濃度分佈狀況。設計 a 和 b 內部的有機蒸氣濃度明顯高於設計 c，因此說明設計 c 為三者中較佳的設計。

除了定性的觀察濃度分佈之外，從 COMSOL 模擬結果中我們亦可獲取模型中定量的資訊。我們統計在 60 秒排煙操作之後，三種設計中有機蒸氣濃度高於 5 ppm 的區域百分比分別為：設計 a 85%、設計 b 83%、設計 c 64%。此結果說明無論就定性的濃度分佈(Figure 3)或是定量的濃度分析來檢視設計結果，都可得到設計 c 優於其他兩者的狀況。

在本計畫中，我們將持須優化實驗室的排煙設備設計。我們將研究桌上型排煙櫃與抽氣式藥品櫃兩種裝置的設計原則。台灣廠商所販售的桌上型排煙櫃與藥品櫃皆無太大差異，在設計上有許多優化空間。我們將利用 COMSOL 分析設備內部細節的流場變化(Figure 4)，藉此提出排煙設備優化的準則。

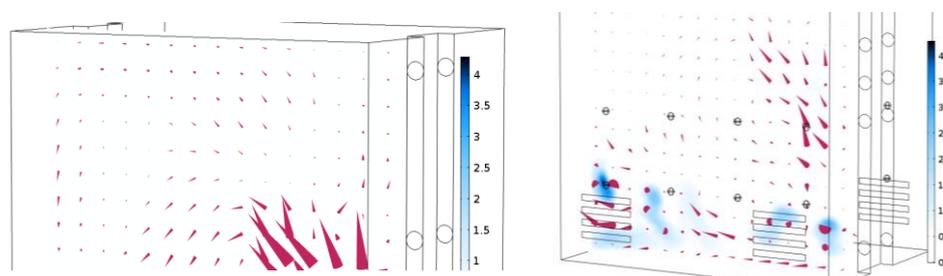


Figure 4. 一排煙櫃上半部(左)與下半部(右)的流速分佈情形。

主題二：薄膜材料內部質量輸送的探討

本實驗團隊之研究主題於薄膜材料於分離程序之應用。薄膜分離程序當中涉及物質(欲分離之小分子，如二氧化碳、氫氣、乙醇蒸氣、水蒸氣等等)於薄膜內部之質量輸送行為。在實驗當中，我們往往只能觀察到巨觀的薄膜輸送結果，例如：某個薄膜樣品在某操作條件下所展現之水蒸氣通量為何。然而，這樣巨觀的實驗結果可能受到微觀的薄膜微結構與基材微結構共同影響。若我們能夠系統性分析薄膜或是基材微結構與質量輸送性質對於巨觀薄膜輸送之結果，便能夠釐清實驗中各項結果的背後學理與機制為何。舉例來說，過去我們曾探討過兩種不同複合薄膜內部的質量輸送狀況(Figure 5)。

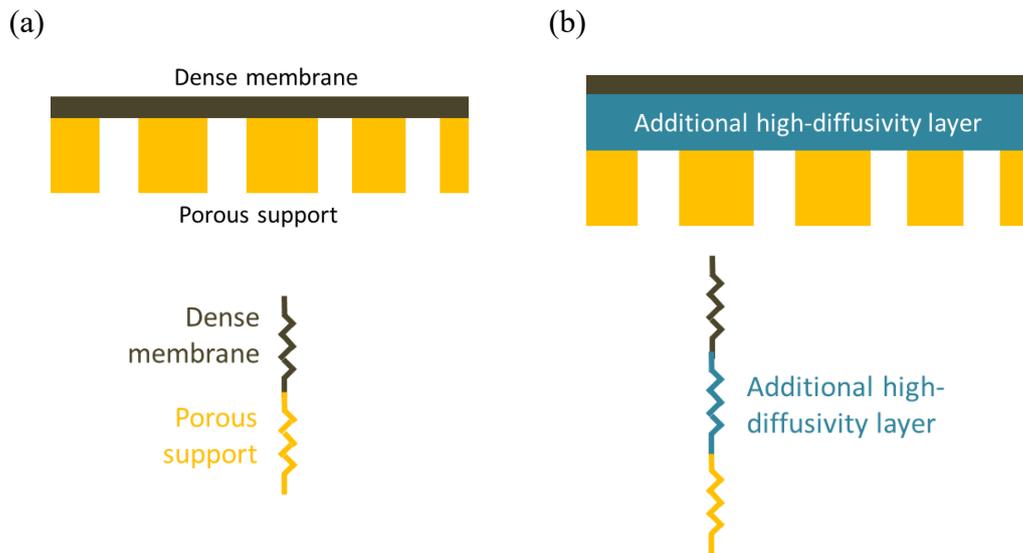
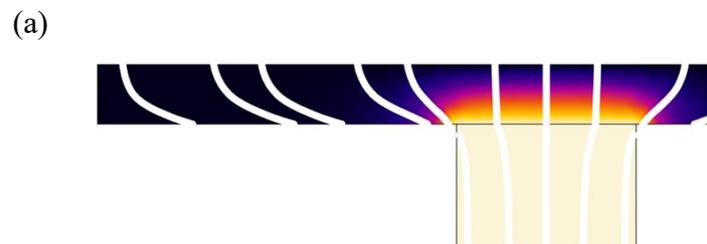


Figure 5. 兩種不同結構的多層複合薄膜之結構示意圖(上)與 1D 質傳阻抗串聯圖。

其中複合材料 a 為一層緻密薄膜(質傳阻力高)塗布在孔洞性基材上，複合材料 b 為兩者中間增加了一層高通透性的薄膜(質傳阻力低)。在傳統阻抗模型的分析中，複合材料 b 比複合材料 a 多了一道質傳阻力，因此複合材料 b 將有著更高的等效質傳阻力。

然而，當我們用 COMSOL 軟體模擬兩種複合材料的質量輸送行為，卻得到相反的結果：複合材料 b 的等效質傳阻力低於複合材料 a。其原因為複合材料 b 中增添的低阻力輸送層，大幅改變了物質在材料內部的輸送路徑(Figure 6)。



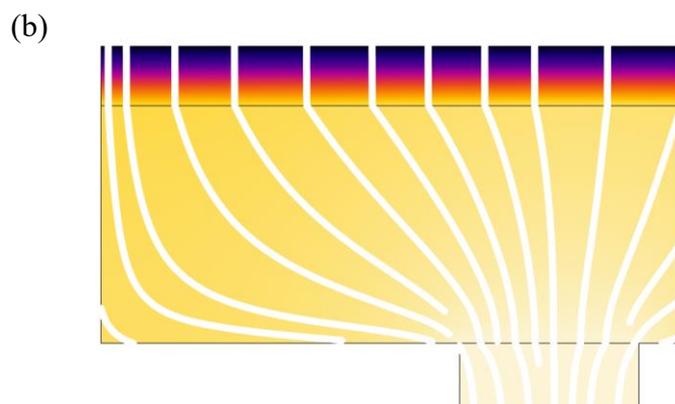


Figure 6. 以 COMSOL 模擬兩種不同結構之複合薄膜內部質量輸送情形。

在複合材料 a 中，物質在最上方高質傳阻力層走了相當長的路徑，才到達下方的多孔性基材。而在複合材料 b 中，因為高質傳阻力層與多孔基材中間加入了一層低阻力輸送層，因此大幅縮短了物質在最上方高質傳阻力層中輸送的路徑。上述的模擬結果違背了利用簡化後一維阻抗模型的分析結果，說明若沒有利用像 COMSOL 這樣的模擬工具，難以分析、預測真實薄膜材料內的質量輸送行為。在本研究中，本實驗團隊將於多孔性氧化鋁基材上製備緻密且具有分子選擇性的金屬有機骨架(MOF)薄膜，我們也將同時利用 COMSOL 建構此薄膜模型，並且模擬其質量輸送的結果(Figure 7)。

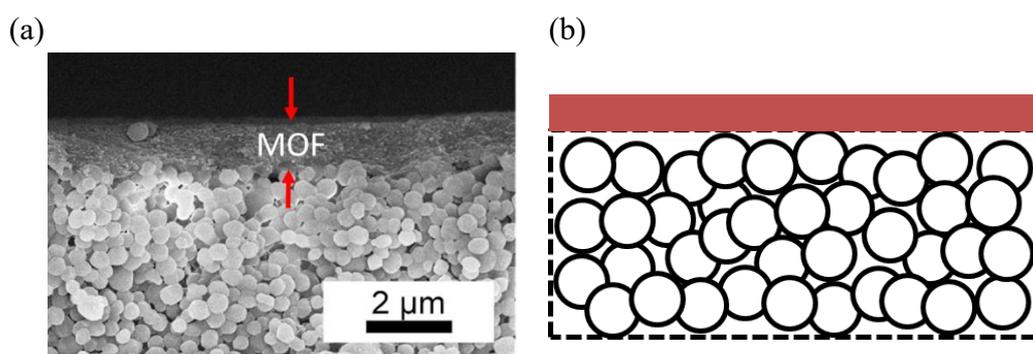


Figure 7. (a) 在多孔氧化鋁基材上塗布薄膜之 SEM 照片；(b)多層複合薄膜之結構示意圖。

主題三：工業級化學反應器的設計與放大

化學反應器為化學、食品、化妝品、生物工業中的關鍵設備之一。在實驗室等級的小型反應器中，因為反應器內部較容易混合均勻、溫度也容易控制，因此

可以視其為理想反應器(ideal reactor)。穩態之理想反應器的設計方程式多數具有解析解，能夠透過仍人工簡易運算後求得反應器設計參數。

然而，當反應器體積增大，到達工業級量產尺寸時，反應器內部的攪拌機制將顯著影響其流場分佈。在工業級反應器中，流場分佈均勻與否、反應器內是否有未受攪拌之 dead zone 產生、反應器控溫狀況皆會影響反應的產率與選擇性。因此我們預計用 COMSOL 來模擬反應器中的流場、溫度、濃度分佈，藉此優化反應器的設計。

過去我們曾經進行攪拌槽的模擬，分析不同數量擋板所造成的流場差異，與攪拌特徵曲線的差異(Figure 8)。

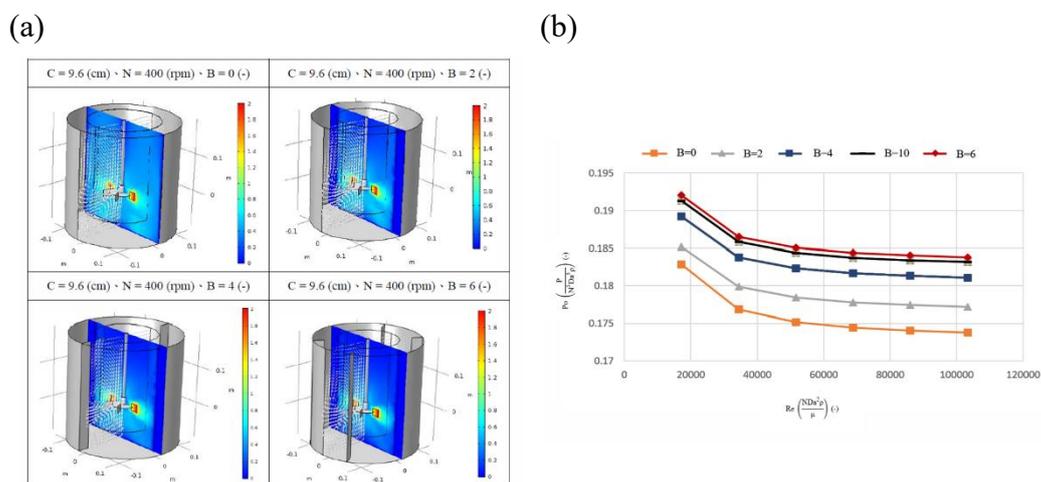


Figure 8. 不同數量擋板攪拌槽之(a)COMSOL 模擬之流場分佈圖、(b)操作特徵曲線。

在本計畫中，我們將以先前模擬攪拌器的成果為基礎，在模型中加入化學反應、質量傳遞、熱傳遞等三種物理現象，設計工業級的化學反應器。

預期成效

我們預計利用未來三年時間完成上述三項研究工作，此三項研究工作包含了基礎的材料科學研究與和工業界相關的電腦輔助工程。因此我們預計在計畫執行期間，能夠發表 3-5 篇和本研究相關的國際期刊論文、1-2 篇專利，並且與台灣產業界合作，以電腦輔助工程技術轉移的方式協助產業升級。在人才培育方面，我們預計培育 4-6 位具有電腦輔助工程專長的碩士生、1-2 位博士生。