行政院國家科學委員會補助專題研究計畫 □ 成果報告 □期中進度報告

稀薄氣流與連續流一體化數值計算法研究

計畫類別：■ 個別型計畫　　□ 整合型計畫
計畫編號：NSC 96－2221－E－019－067－MY2
執行期間：　96 年　08 月　01 日至　97 年　07 月　31 日

計畫主持人：黃俊誠
共同主持人：
計畫參與人員：　邱沅明、洪捷粲、張家瑋、謝珮君、余致緯

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)：■精簡報告　□完整報告

本成果報告包括以下應繳交之附件：
□赴國外出差或研習心得報告一份
□赴大陸地區出差或研習心得報告一份
□出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份
□國際合作研究計畫國外研究報告書一份

處理方式：除產學合作研究計畫、提升產業技術及人才培育研究計畫、列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢
□涉及專利或其他智慧財產權，□一年□二年後可公開查詢

執行單位：國立台灣海洋大學

中　華　民　國　97 年　05 月　31 日

稀薄氣流與連續流一體化數值計算法研究
Unified Computational Methods for Rarefied and Continuum Flow

黃俊誠
台灣海洋大學商船系

摘要

本計畫目標將應用分立座標法結合 CFD 相關技術，發展三維 Model Boltzmann 方程式數值計算技術，應用於運載火箭、探空火箭、再入戰術導彈等之稀薄氣體動力學分析。同時本計畫也將結合 Navier-Stokes 與 Model Boltzmann 方程式的計算法，建立一體化（unified）連續體流與稀薄流模擬技術，提高近連續體流氣動力學計算效率與精度。使高空飛行器的氣動力分析技術更完備。本研究第一年將開發 Model Boltzmann 方程式數值計算程式，並建立連續體流與稀薄流一體化計算技術。第二年將建立動態負載平衡平行運算技術，提高運算效率，並應用於極超音速高空飛行器稀薄氣動力學分析。本項新開發技術除了應用於飛行器氣動力學研究外，也可以推廣應用於太空推進器、衛星姿態控制噴嘴、真空泵浦、化學氣相沉積、以及微機電系統等科學及工業上。本報告摘錄第一年簡要成果。

Keywords: Rarefied gas dynamics, Model Boltzmann equation, Discrete ordinate method, High resolution conservative scheme, WENO scheme, Space-Time conservative scheme, CESE method, Gauss-Hermite quadrature.

1. 簡介

傳統上高空飛行器氣動力學分析是針對各種氣體流域（連續流、稀薄流）的特性，採用適當的方法。在連續流域，以計算流體力學(CFD)技術解 Navier-Stokes 或 Euler 方程式獲得飛行器表面壓力、溫度、周圍流場結構與氣動力係數等相關資料。在 Knudsen 數較大的過渡流區（Transition regime）則以 DSMC 法計算稀薄氣流的空氣動力學特性。稀薄氣體流的數學模型方程式為 Boltzmann 方程式，為非線性純量積分－微分方程式(Nonlinear Scalar Integro- differential Equation)。以數值方法求解主要困難在於處理複雜的碰撞積分項以及七個自變數，包括位置空間、速度空間與時間。過去在不同的近似理念與限制條件下，有多種數值解法被提出。其中 DSMC(Direct Simulation Monte Carlo)法為目前發展最為廣泛與完備的方法，且已實際應用到高空飛行器設計。對於 Knudsen 數較低的近連續體流域或是極低速流場計算，DSMC 必須採用相當大量的模擬粒子數並降低時間步以減少誤差，計算成本將相當高。雖然發展信息保存（Information Preservation; IP）方法，應用於平衡狀態低速流計算，可大幅降低取樣次數，但無法應用於非平衡狀態流場模擬，且計算量仍然相當大。近年 Bird(2006)、Cave(2007) 等發展非定常取樣法 (Unsteady sampling) 以及暫態次網格(Transient sub-cell)使 DSMC 法可應用於非定常流的計算，改善碰撞取樣品質，大幅減少計算時間。另外為了改進近連續體流計算的問題，1990 年代以後有多位學者結合 DSMC 法與 CFD 計算技術，發展混合（hybrid）數值模擬法，稀薄流區域以 DSMC 法計算，連續體流區域以 Navier-Stokes 方程式計算。但由於 DSMC 法計算結果之統計散佈擾動常傳播至 CFD 計算區，使整個流場擾動而不易收斂。未來技術發展完成應可擴展 DSMC 法的應用領域。另外，近年直接求解 Boltzmann 方程式也陸續有研究成果發表 Aristov (2005)，但計算量相當大，必須配合其他減少計算量的作法，發展可行的計算程序。期望在電腦運算能量迅速進展的未來，本項方法將能有相當的發展。

從實際應用需求，本研究應用分立座標法（Discrete Ordinate method）解 Model Boltzmann

方程式，並結合 Euler 或 Navier Stokes 方程式數值解法，發展稀薄氣流與連續流一體化數值計算法。本項新開發技術除了可以非常有效率的應用於飛行器氣動力學研究外，也可以推廣應用於太空推進器、衛星姿態控制噴嘴、真空泵浦、化學氣相沉積、以及微機電系統等科學及工業上。

本研究計畫第一年已初步完成 Model Boltzmann 方程式計算程式發展。並應用時空守恒法 CESE 建立一體化解 Euler 方程式與 Model Boltzmann 方程式的測試程式，並探討數種稀薄度測試法則的是用性。本報告第一節為背景說明，第二節為數值計算法，第三節為結果與討論。

2. 數值方法

2.1 Model Boltzmann 方程式

無因次化 Boltzmann 模型方程式可寫成：

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\vec{\mathrm{v}}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{x}}=\nu\left(f^{+}-f\right),$$

其中 t 為時間，$\vec{x}$ 為位置空間，$\vec{\mathrm{v}}$ 為分子速度，$f(\vec{x},\vec{\mathrm{v}},t)$ 是 Maxwell 分佈函數，為空間位置 $\vec{x}=(x,y,z)$ 與分子速度 $\vec{\mathrm{v}}=(\mathrm{v}_x,\mathrm{v}_y,\mathrm{v}_z)$ 之函數。$\nu=\nu(n,T)$ 是碰撞頻率，$n=n(\vec{x})$ 為氣流分子數密度，$T=T(\vec{x})$ 為氣流的平衡溫度。f^{+} 為分子平衡分布函數，考慮 BGK 模型，$f^{+}=f^{M}$。f^{M} 為 Maxwell 分子分布函數。考慮 Shakov 模型，則 f^{+} 為

$$f^{+}=f^{M}\left[1+\frac{(1-\mathrm{Pr})\vec{c}\cdot\vec{q}\left(c^{2}/RT-5\right)}{5pRT}\right]$$

其中 Pr 為 Prandtl 數，$\vec{c}$ 是分子熱速度，等於分子速度 $\vec{\mathrm{v}}$ 與氣流速度 $\vec{u}$ 差，即 $\vec{c}=\vec{\mathrm{v}}-\vec{u}$，$\vec{q}$ 為氣流熱通量，p 為氣流壓力。

巨觀流動參數如分子數密度 n、流動速度 $\vec{u}$、平衡溫度 T、壓力 p 與熱通量 $\vec{q}$ 等分別可寫為：

$$n=\int_{-\infty}^{\infty} f d\vec{\mathrm{v}} \qquad n\vec{u}=\int_{-\infty}^{\infty}\vec{\mathrm{v}} f d\vec{\mathrm{v}}$$

$$\frac{3}{2}nT=\int_{-\infty}^{\infty}\left(\vec{\mathrm{v}}-\vec{u}\right)^{2} f d\vec{\mathrm{v}} \qquad p=nT$$

$$\vec{q}=\int_{-\infty}^{\infty}\left(\vec{\mathrm{v}}-\vec{u}\right)\left(\vec{\mathrm{v}}-\vec{u}\right)^{2} f d\vec{\mathrm{v}}$$

而應力張量（stress tensor）P_{ij} 與剪應力張量（shear stress tensor）τ_{ij} 可寫成：

$$P_{ij}=2\int_{-\infty}^{\infty}\left(\mathrm{v}_i-u_i\right)\left(\mathrm{v}_j-u_j\right) f d\vec{\mathrm{v}}$$

$$\tau_{ij}=-P_{ij}-\delta_{ij}p$$

2.2 分立座標法

分立座標法將 Model Boltzmann 方程式中速度空間的積分項，用一積分公式取代以求近似積分值。使原本在速度空間及位置空間均為連續函數之微擾分佈函數，以一組在位置空間連續而在速度空間分立的函數代替；每一個新的分立函數均是原分佈函數在適當分立座標點上的函數值。因此將原來在位置空間、速度空間、及時間軸上均連續的分佈函數積分微分方程式轉換成一組在位置空間及時間上連續，然而在速度空間為點函數的微分方程組，大為簡化了數值計算上的困難。分立化之分布函數可寫成：

$$f(x,y,z,\mathrm{v}_l,\mathrm{v}_m,\mathrm{v}_n,t)=f_{l,m,m}(x,y,z,t)$$

當計算獲得各分立分布函數 $f_{l,m,n}$ 後，可以利用同樣的積分公式代入這些力矩積分中，求得各巨觀氣體特性，更加簡化了計算上的複雜度。

2.3 流場稀薄度測試

對於較單純流場結構且定常態流動計算時，一般可以在開始計算前設定好連續體流與稀薄流的適用區域，分別計算求解。但對於較複雜的流場結構或是非定常流動的計算時，不易事先分別連續體流與稀薄流的適用區域。必須引用計算過程中流場的巨觀或微觀參數建立流場稀薄度計算判別公式，以及判別適用何種解法的參考基準值。Aristov et al.(2005)提出四種稀薄度參數 S 計算公式如下：

$$S_p=\frac{\sqrt{p_{ii}^{2}}}{p} \qquad S_{kn}=\frac{Kn\nabla\rho}{\rho}$$

$$S_g=Kn\sqrt{\left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right)^{2}+\frac{1}{T}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right)^{2}}$$

$$S_{NS}=Kn\sqrt{\left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right)^{2}+\frac{1}{T}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right)^{2}\Big/u^{2}}$$

參數 S 大於稀薄流參考值時視為稀薄流區域。四種參數的適用性，以及其相對應的參考值則有待再研究。另外，從微觀的分子分布函數計算平衡

矩參數也可用於流場稀薄度判別標準：

$$S = \int_{R^3} | f - f^M | d\bar{v}$$

用以判別定常流場中熱非平衡效應（thermo-nonequilibrium）。但此微觀判別式較之前述之巨觀判別式更需要電腦計算時間。本計畫將測試與驗證以上各種判別式的適用標準。

2.4 CESE 方法

時空守恆法(Space Time Conservation Method) CESE 法是在每個計算網格點上建立 CE (Conservation Element)與 SE (Solution Element)，使計算參數在時間與空間滿足局部與全域守恆。並保留應變函數的一階空間微分為求解變數，而非應用差分離散計算。本研究引用 Chang(1995)(2007)的 $a-\varepsilon-\alpha-\beta$ 算則與 $c-\tau$ 算則，與 Yu(1997)處理 Stiff Source 方法解 Model Boltzmann 方程式。關於分子運動部份，網格點分布函數與其對空間一階微分可寫成：

$$f_j^n = \frac{1}{2}\left[(1-\sigma)(s_+)_{j+1/2}^{n-1/2} + (1+\sigma)(s_-)_{j-1/2}^{n-1/2}\right]$$

$$\left(f_x^+\right)_j^n = \left(f_x^{a+}\right)_j^n + 2\varepsilon\left(f_x^{c+} - f_x^{a+}\right)_j^n + \beta\left(f_x^{w+} - f_x^{c+}\right)_j^n$$

其中

$$(s_+)_{j+1/2}^{n-1/2} = [f - (1+\sigma) f_x^+]_{j+1/2}^{n-1/2}$$

$$(s_-)_{j-1/2}^{n-1/2} = [f + (1-\sigma) f_x^+]_{j-1/2}^{n-1/2}$$

$$\left(f_x^+\right)_j^n = \frac{\Delta x}{4}(f_x)_j^n \qquad \sigma = \mathrm{v}_x \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

$$\left(f_x^{a+}\right)_j^n = \frac{1}{2}\left[(s_+)_{j+1/2}^{n-1/2} - (s_-)_{j-1/2}^{n-1/2}\right]$$

$$\left(f_x^{c+}\right)_j^n = \frac{\Delta x}{4}\left[\frac{f_{j+1/2}'^n - f_{j-1/2}'^n}{(1+\tau)\Delta x/2}\right]$$

$$f_{j+1/2}'^n = [f - (1+2\sigma-\tau) f_x^+]_{j+1/2}^{n-1/2}$$

$$f_{j-1/2}'^n = [f + (1-2\sigma-\tau) f_x^+]_{j-1/2}^{n-1/2}$$

$$\left(f_x^{w+}\right)_j^n = W_0\left(\left(f_{x+}^{c+}\right)_j^n, \left(f_{x-}^{c+}\right)_j^n; \alpha\right)$$

$$\left(f_{x\pm}^{c+}\right)_j^n = \pm\frac{1}{2}\left(f_{j\pm1/2}'^n - f_j^n\right)$$

$$W_0(x_-, x_+; \alpha) = \frac{|x_+|^\alpha x_- + |x_-|^\alpha x_+}{|x_+|^\alpha + |x_-|^\alpha}$$

其中 ε、α 與 β 為控制參數。若 $\varepsilon = 0$，$\beta = 0$ 則上式簡化成 a scheme，$\varepsilon = 0$，$\beta = 0$ 則上式簡化成 c scheme，$0 \le \varepsilon \le 1$，$\beta = 0$ 則上式簡化成 $a-\varepsilon$ scheme。當 $\tau = 0$、$\varepsilon = 0$ 與 $\beta = 0$ 則為 $c-\tau$ scheme，當 $\tau = 1$ 時上式為 $a-\varepsilon-\alpha-\beta$ scheme。

由於假設稀疏(dilute)氣體，分子碰撞過程的時間遠小於平均發生碰撞的時間。因此解 Model Boltzmann 方程式時將其分離成不考慮碰撞的分子運動過程，與只考慮分子碰撞的影響兩個過程。若令 f_j^{n-} 表示無碰撞結果，則分子碰撞項計算如下：

$$f_j^n = \left(f_j^{n-}\right) + \frac{\Delta t}{2}\left[\nu\left(f^+ - f\right)\right]_j^n$$

上式對於 f_j^n 為非線性代數方程式，可以用牛頓法求解。

3. 結果與討論

考慮一震波管，在 x=0.5 處，時間 t=0 時，以一薄膜分隔成二區域，薄膜左右兩邊氣體分別處於不同的平衡狀態，假設參考狀態為 $\rho_\infty = 1$、$T_\infty = 1$、$V_\infty = \sqrt{2RT_\infty}$，Lax 震波管問題薄膜左右兩邊氣體初始狀態設定如下：

$$(\rho_l, T_l, u_l) = (0.445, 13.21, 0.637)$$

$$(\rho_r, T_r, u_r) = (0.500, 1.900, 0.000)$$

薄膜破裂後產生向右移動的震波與接觸面，震波移動速度較快，膨脹波向左移動。以 100 格點數計算，即 $\Delta x = 0.01$，以二階 Newton-Cotes 積分公式，取 181 速度分立點，等間隔 $\Delta \mathrm{v}_x = 0.2$ 分佈，

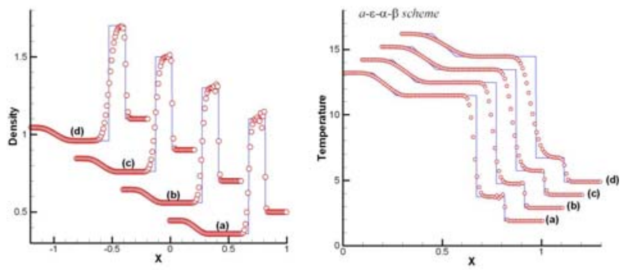


圖 1、Lax 震波管密度(左)與溫度(右)，(a) $\beta = 0.01$，(b) $\beta = 0.05$，(c) $\beta = 0.1$，(d) $\beta = 0.2$。

散佈範圍從 v_x=-18 至+18，假設參考長度 L=1。考量近連續體流動條件($Kn_\infty = 0.001$)氬氣體。以下各圖均是無因次時間 0.13 的結果。圖 1 為 $a-\varepsilon-\alpha-\beta$ 算則計算結果。圖中圓圈符號為單原子 BGK 模型方程式計算結果，實線為尤拉模型方程式的正解。固定參數 $\varepsilon = 0.01$、$\alpha = 2$。比較參數 β 大小對震波解析度計算影響不大，但影響波後震盪，對接觸面的解析度影響較明顯。

圖 2 固定參數 $\alpha=2$，$\beta=0.01$，比較參數 ε 對計算結果的影響。ε 對震波與接觸面的解析度影響不大。但是對於波後的震盪現象有抑制的效果。圖 3 為 $Kn_\infty=0.001$、0.01、0.1 計算結果。氣體稀薄效應影響下，顯現出相當大的差異。$Kn_\infty=0.001$ 條件時已接近連續體模型。$Kn_\infty=0.1$ 條件下受氣體稀薄效應的影響，各流場結構區已相互重疊。

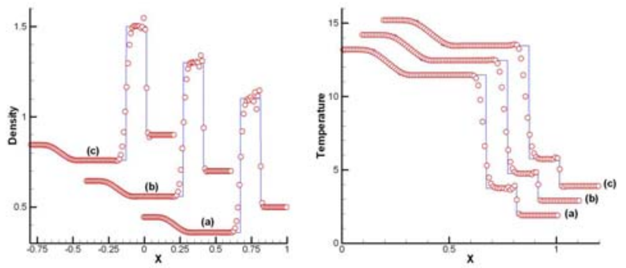


圖 2、Lax 震波管密度(左)與溫度(右)，(a) $\varepsilon=0.01$，(b) $\varepsilon=0.1$，(c) $\varepsilon=0.2$。

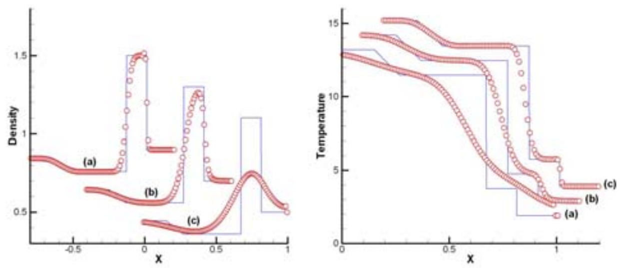
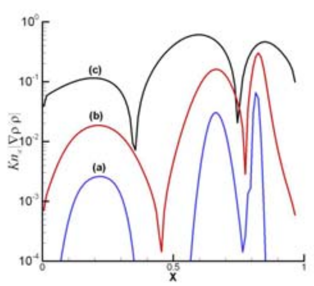


圖 3、Lax 震波管密度(左)與溫度(右)，(a) $Kn_\infty=0.001$ (b) $Kn_\infty=0.01$ (c) $Kn_\infty=0.1$

圖 4 為稀薄度參數 $S_{Kn}(=Kn_\infty\nabla\rho/\rho)$ 在 Kn_∞ = 0.001、0.01、0.1 三種條件下的分布圖。在膨脹波、震波與接觸面處均明顯增大。以 $Kn_\infty=0.001$ 為例，震波與接觸面處之稀薄度參數 S_{Kn} 達到 0.05



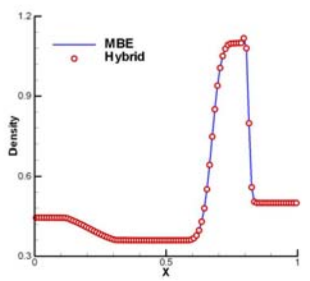


圖 4 稀薄度參數 S_{Kn}，Kn_∞ (a)0.001(b)0.01(c)0.1

圖 5 一體化解法驗證

以上。圖 5 比較 BGK 模型方程式計算結果(實線)與 Hybrid 解(結合 Euler 與 MBE 解的一體化計算法) 二種計算結果完全一致。初步驗證本研究所發展的稀薄氣流與連續流一體化數值計算法。

4. 結論

基於以上一維震波管測試，可初步驗證本計畫所發展的 Model Boltzmann 方程式數值計算法(包括應用時空守恆 CESE 算則及守恆率 WENO 算則)。同時也初步建立結合 Euler 與 Model Boltzmann 方程式解的一體化計算法。初步驗證本研究所發展的稀薄氣流與連續流一體化數值計算法。除本報告所列的結果外，本計畫前期已進行的成果包括平行化二維與三維 Model Boltzmannz 方程式數值程式發展、分子動力通量法解 Euler 方程式等。部分成果已準備投稿期刊，同時本年 7 月也將發表於 26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics。

Reference

1. Bird, G.A., Sophisticated Versus Simple DSMC, in Proceedings of the 25th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (RGD25), 2006.
2. Aristov, V. V., Frolova, A. A., Zabelok, S. A., Kolobov, V. I. and Arslanbekov, R. R., (2005), “Unified Flow Solver Coupling Solution of the Boltzmann Equation and Gas Dynamic Equations,” THE 6TH ACFD, TAIWAN, OCT. 24-OCT. 27.
3. Cave, H.M., Tseng, K.-C., Wu, J.-S., Jermy, M.C., Huang, J.-C. & Krumdieck, S.P., Implementation of Unsteady Sampling Procedures for the Parallel Direct Simulation Monte Carlo Method, J. Comput. Phys. (in press, 2008)
4. Chang, Sin-Chung, The Method of Space-Time Conservation Element and Solution Element－A New Approach for Solving the Navier-Stokes and Euler Equations, J. Comput. Phys., 119, 295-324, (1995).
5. Chang, Sin-Chung, The Space-Time CESE Method－Motivating Ideal, Basic Schemes and Its Recent Developments, Lecture Note of 1st Taiwan-USA Workshop on CESE Method, Aug., (2007)
6. Yu, Sheng-Tao and Chang, Sin-Chung, Treatments of Stiff Source Terms in Conservation Laws by the Method of Space-Time Conservation Element and Solution Element, AIAA 97-0435 (1997)

可供推廣之研發成果資料表

☐ 可申請專利　☐ 可技術移轉　　日期：97 年 05 月 31 日

國科會補助計畫	計畫名稱：連續流與稀薄氣流一體化數值計算法研究 計畫主持人：黃俊誠 計畫編號：NSC 96-2221-E-019 -067 -MY2　學門領域：航太科技
技術/創作名稱	稀薄氣體流模擬軟體
發明人/創作人	黃俊誠
技術說明	中文： 稀薄氣體流模擬軟體應用分立座標法、Gauss- Hermite 積分法、時空守恆算則 CESE 解 Boltzmann 模型方程式。 英文： The rarefied gas simulation code solves the model Boltzmann equations, with discrete ordinate method, and the space-time conservative CESE scheme.
可利用之產業及可開發之產品	本計畫成果可推廣應用於衛星姿態控制噴嘴、真空泵浦、化學氣相沉積、以及微機電系統等科學及工業上。在太空計畫、國防科技與產業發展等均能有所助益。
技術特點	本項技術 CFD 方法解 Model Boltzmann 方程式，應用於稀薄氣體流模擬與分析。尤其應用在近連續體流區域流，以及中、低馬赫速流場模擬時，更能顯現其計算效率與準確度。
推廣及運用的價值	本軟體計算效率高，並可處理複雜的幾何外形，可應用於近連續體流至稀薄流場模擬。

1. 每項研發成果請填寫一式二份，一份隨成果報告送繳本會，一份送　貴單位研發成果推廣單位（如技術移轉中心）。
2. **本項研發成果若尚未申請專利，請勿揭露可申請專利之主要內容。**
3. 本表若不敷使用，請自行影印使用。