

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

稀薄氣體自由剪力層中紊性傳遞現象之綜合探討

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC92-2212-E-032-005-

執行期間：92年08月01日至93年07月31日

執行單位：淡江大學機械與機電工程學系

計畫主持人：杜文謙

共同主持人：洪祖昌

計畫參與人員：鄭朝恩、羅文彬

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 93 年 11 月 1 日

行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

稀薄氣體自由剪力層中紊性傳遞現象之綜合探討

The Turbulent Transport phenomena In a Rarefied Free Shear

計畫編號：NSC 92-2212-E-032-005

執行期限：92年8月1日至93年7月31日

主持人：杜文謙 淡江大學

共同主持人：洪祖昌 淡江大學

一、中文摘要

過去我們以直接模擬蒙地卡羅(Direct Simulation Monte Carlo)法計算超極音速稀薄氣體中自由剪力流之流場性質以及速度脈動相關函數， $\overline{u'v'}$ 、 $\overline{u'^2}$ 、 $\overline{u'^2 v'}$等表現之動量傳遞現象，以及對溫度與速度脈動相關函數， $\overline{u'T'}$ 、 $\overline{v'T'}$ 之探討，我們也對相對應之速度空間 pdf($f(u')$ 、 $f(v')$)、動量聯合機率密度函數 $f(u',v')$ 及溫度與速度之聯合機率密度函數 $f(u',T')$ 、 $f(v',T')$ 均已做分析探討，本計畫進一步探討稀薄氣體剪力層中類似連流中之紊性質傳現象，對 $\overline{u'C'}$ 、 $\overline{v'C'}$ 加以分析探討。

本計畫計算分析質傳 $\overline{u'C'}$ 、 $\overline{v'C'}$ ，並計算相對應之 $f(C')$ 及聯合機率密度函數 $f(u',C')$ 、 $f(v',C')$ ，並試圖作此傳遞現象之統計物理上的解釋。

關鍵詞：直接模擬蒙地卡羅法、自由剪力流、稀薄氣體

Abstract

The direct simulation of Monte Carlo method was employed to calculate the flow structure, such as mean velocity, temperature, pressure and mean quantities of momentum fluctuations correlations in free shear layer at hypersonic speed. The momentum and temperature fluctuation correlations, $\overline{u'T'}$ and $\overline{v'T'}$, were also investigated. The corresponding probability density function in velocity space, $f(u')$ and $f(v')$, and the jpdf

distributions, $f(u',v')$, $f(u',T')$ and $f(v',T')$ were also investigated. This study will investigate the momentum and concentration fluctuation correlations, $\overline{u'C'}$ and $\overline{v'C'}$, which are similar to the mass transport phenomenon of continuum flow and calculates the corresponding $f(C')$ and jpdf distributions, $f(u',C')$ and $f(v',C')$. This study also investigates this transport phenomenon by stochastic physics.

Keywords：DSMC, Rarefied gas, Free shear layer

二、緒論

自1920年代早期開始，二平行流之混合便引起工程師的興趣[1,2]。此自由紊性混合過程是飛行器下游流場及燃燒系統中油汽反應區之基本現象。至今這個問題還沒有完整的解析解，傳統解決之道，是直接針對紊流統御方程式中之高階項，予以模式化(modeling)，並借助實驗數據或數學分析，決定出模式中之係數，此稱現象論方法(phenomenological approach)。許多學者曾對此問題做過實驗以及數值分析[3-11]。另外由機率密度之觀點切入，也可正確描述具隨機特性之紊流場，此方法稱機率密度函數法(pdf method)[11]，也曾被用來計算自由剪力流[12]。近年來，因為超音速燃燒衝壓引擎(scramjet)的發展，重新吸引了學者們對於超音速下兩平行流混和現象的興趣。在超音速下之自由剪力流的數值分析[14-16]，以及實驗[17-21]皆有探討。近年來因為太空運輸系統的研究與發

展，飛行器在高空和超極音速下之流場結構亦受到注意，而其下游流場亦具有這種特性。文獻中亦有探討超音速之自由剪力流之實驗[22]。

流場分析一般採用之模型可分巨觀與微觀二種。巨觀模型即是連續流體 Navier-Stokes 方程式之解析，而微觀模型就是用分子氣體動力論 (molecular gas dynamics)，將氣體視為一群離散分子所組成的結構，用波茲曼 (Boltzmann) 方程式來分析。當巨觀描述之變數 (密度，壓力等性質) 的梯度變得很大致使其尺度與分子平均自由徑 (molecular mean free path) 很接近時，Navier-Stokes 方程式將不適用。而超極音速 (hypersonic) 通常發生在距地面極高之高度，如高速飛行體重返大氣層前後，分子平均自由徑相當大，因此對稀薄氣體流場須用波茲曼方程式來處理之 [23]。文獻 24 中提到波茲曼 (Boltzmann) 方程式求解方法有兩種解析法：動量法 (moment method) 及模式化求解 (model method)，以及四種數值方法：Direct Boltzmann CFD, Deterministic Simulations, Probabilistic Simulation Methods and Discretization Methods。而本文採用的直接模擬蒙地卡羅法 (Direct Simulation Monte Carlo Method) 即是機率模擬法 (Probabilistic Simulation Methods) 中的一種 [25]。直接模擬蒙地卡羅法是由 Bird [26] 所提出。對於直接模擬蒙地卡羅法之詳細描述可參照文獻 24, 27。於 1978 年，Bird 曾探討直接模擬蒙地卡羅法早期之背景，並與分子動力學以及其他種方法作比較 [28]。1989 年，Muntz 探討於稀薄氣體動力學中所做過之研究，偏重於比較其使用之計算方法 [29]。Cheng 於 1993 年的文獻中強調的則是高溫，超極音速黏性流體之氣體動力學 [30]。1995 年，Cheng 和 Emmanuel 探討直接模擬蒙地卡羅法之應用，並且在低紐森數區域比較直接模擬蒙地卡羅法、Navier-Stokes 分析以及實驗三者所獲得的結果 [31]。1998 年，Oran 等則討論應用直接模擬蒙地卡羅法於探討微尺度元件 (microdevices) 中氣體之特性 [32]。另外 Bird 又於 1998 年討論直接模擬蒙地卡羅法近年來的發展與挑戰以及其可使用的範圍 [33]。近年來，學者們致力於應用直接模擬

蒙地卡羅法於微尺度元件之低速流場。Nance 等人應用直接模擬蒙地卡羅法來模擬相似於普葉修流 (Poiseuille flow) 之微管流 [34]。Fan 和 Shen 使用 DSMC-IP 法成功模擬一維低速微管流 [35]。Cai 等人將 DSMC-IP 法做了一些修正，並將之擴展應用於二維之低速微管流 [36]。Pan 等人則是提出 MB-DSMC 法來降低模擬低速微管流時所產生之統計誤差 (statistical error) [37]。因為本篇論文探討高空，超極音速之稀薄氣體自由剪力流，故沒有統計誤差過大之問題。

稀薄氣體自由剪力流中之動量相關函數及其各種機率密度函數甚少被論及，且文獻中亦甚少出現。然而稀薄氣體自由剪力流中類似連流紊性傳遞現象之動量相關函數的確存在，而且可以計算。Bird 曾計算均勻稀薄氣體中部分脈動相關函數 [24]，以及震波中之速度分佈函數 [38]。Phan-Van-Diep 等人以直接模擬蒙地卡羅法算過超極音速震波中之速度分佈函數，並與實驗結果相比較，在定量上得到很好的結果 [39]。Stefanov 等人計算了稀薄氣體超極音速流通過一圓柱之流場的雷諾剪應力 (Renold' Stress) [40]。但是在稀薄氣體自由剪力流中之動量相關函數及其各種機率密度函數則未被提及。

本實驗室曾以單原子分子模型計算了簡單外形之二維流場 [41]，隨後改良為雙原子分子模型並以適形 (body fitted) 網格將之用於二維圓頭鈍體 [42]，接著亦以雙原子分子模型計算鮮為人注意之二維極音速稀薄氣體自由剪力流中各動量相關函數和溫度、壓力、密度、速度等性質之分佈狀況及其速度機率密度函數 [43]，唯在平行混合流裏，除了動量、能量傳遞外還有質量的傳遞，故本文計算混合層紊性質質量的傳輸，以期對稀薄氣體混合之內在結構、質量傳輸有所了解。

波茲曼方程式本身即為以統計分析方法推導出來的程式，其所要解的就是流場中之機率密度函數；而以蒙地卡羅法模擬之，更能輕易地得到流場中速度分佈狀況和各階動量相關函數的平均值。故本文欲探討以此法求得之稀薄氣體自由剪力流之特性。

三、理論分析

稀薄氣體 (rarefied gas) 定義

分析一流場時，要採用巨觀之連體動力學或微觀的分子氣體動力學，判別標準即在於此流體狀態是否為稀薄。在稀薄氣體中可忽略分子間的相互作用而視其在空間中自由運動，且其中發生之分子碰撞絕大部分為只與兩個分子相關的二元碰撞。

首先定義 Knudsen number :

$$Kn = \lambda / L$$

其中

λ : 分子平均自由徑

L : 流場特徵尺度

稀薄氣體的定義如下:

$$(1) \lambda \gg \delta \gg d$$

$$(2) Kn > 0.1$$

其中

d : 分子直徑

δ : 分子平均容積尺度

一般而言，只要 $\delta \gg d$ 則必然能滿足條件 (1)，而通常取 $\delta/d = 7$ 為界限。

數值方法

直接模擬蒙地卡羅法 (Direct Simulation Monte Carlo)，由 G. A. Bird 於 1963 年所提出，是以電腦來記錄數千或數萬個模擬粒子之位置座標、速度分量，並計算其碰撞和與邊界之交互作用，藉以模擬稀薄氣體於物理空間之變化現象。計算時，先將流場中的模擬區域分割為許多的網格 (cell)，而網格之尺度 Δr 須小到使流過此網格的流場性質變化很小，一般採用 Δr 小於三分之一的分子平均自由徑 (mean free path) 以求得較佳結果。時間隨時間步長 (time step) Δt 離散前進，而 Δt 亦須小於平均碰撞時間 (mean collision time) 方可採用。

分子的運動與碰撞過程可由以下步驟說明之：

- (1) 分子與分子間彼此發生碰撞，改變了速度分量。
- (2) 分子由其速度分量與單位時間移動至下一個位置。

步驟 (1) 中相互碰撞的分子須位於同一子網格 (subcell) 或網格內，而步驟 (2) 的分子則

穿越或游移於網格間。因為通過網格之流場變化很小，網格內之分子可視為一統計樣本，分子間之碰撞可由網格內任意取得一對而相碰)。碰撞後分子的速度可由其碰撞後的移動能來求得。當足夠的碰撞後，使得每個網格的時間計數總和與整個流場時間一致。

DSMC 法是用電腦來記錄分子位置與速度以模擬實際流場，而有限差分法是用數值方式解方程式。受限於電腦速度與容量，DSMC 法今日大部份應用於稀薄氣體，因其平均自由徑與平均碰撞時間較大，故較能藉今日電腦來分析，此外對於震波結構、密度、壓力、溫度變化亦可清楚的描述。

網格設置

與有限差分法之計算相同，DSMC 法須先對所欲計算之流場劃分網格，但其網格只是為了確認分子所在位置，以便選取適當的分子碰撞，故網格的大小與外型除需滿足尺度上的條件外，並無其他特殊限制。本文採用方形網格，因其最易處理，適合用於簡單幾何外形之流場。

起始條件 (Initial Condition)

因為 DSMC 法是直接將粒子置入流場後任其依規定法則在其中運動，而以統計方法取樣一定次數後計算其平均值，故並不限其起始狀態，只需避開未達穩定狀態的前幾次計算不列入統計即可。當然，若起始條件的狀態越接近穩定狀態，則可越早開始取樣。本文採上、下半流場各為高、低速自由流狀態為起始條件。

邊界條件 (Boundary Condition)

自由流邊界可取在遠離流場產生變化而不受其影響之處，應用統計結果求得單位時間進入邊界之粒子數及其速度分佈 (即 Maxwell 分佈)，計算過程如下：

設 R_i 為一在 0 與 1 間均勻分佈的亂數 (下標 i 為正整數，代表選取不同的亂數)，若令

$$r = \{-\ln(R_i)\}^{1/2} v_m \quad \text{及} \quad \theta = 2\pi R_2$$

其中

$v_m = (2kT/m)^{1/2}$ 為平衡氣體在溫度 T 時之最可能分子速率。

則

$v = r \sin \theta$ 及 $w = r \cos \theta$ 為此時垂直於自由流
流場方向之兩個熱速度分量。

若自由流氣體之速度分量分別為 u_∞ 、 v_∞ 、 w_∞ ，而 u_∞ 與自由流同向，且令 $s_n = u_\infty / v_m$ ，則單位面積在單位時間內橫越此邊界之分子數通量為

$$\dot{N} = [(n v_m) / (2\pi^{1/2})] \{ \exp(-s_n^2) + \pi^{1/2} s_n [1 + \text{erf}(s_n)] \}$$

而在與自由流同方向上的熱速度分量 u_n 則

如下面的歸一化分佈函數所示

$$f_{u_n} = \frac{2(u_n / v_m + s_n)}{s_n + (s_n^2 + 2)^{1/2}} \exp \left\{ \frac{1}{2} + \frac{s_n}{2} \left[s_n - (s_n^2 + 2)^{1/2} \right] - \frac{u_n^2}{v_m^2} \right\}$$

若此值大於 R_3 則採用之，否則重複此步驟至 $f_{u_n} > R_3$ (即 acceptance-rejection)。於是進入邊界的粒子之三個速度分量便分別為 $u_\infty + v_m f_{u_n}$ 、 $v_\infty + v$ 和 $w_\infty + w$ 。

碰撞對 (Collision Pair) 的選擇

在碰撞的過程中，我們乃對每一網
格做個別處理。首先須決定網格中有幾個
碰撞對，由下式可得

$$\text{No. of Pairs} = 1/2 N \bar{N} F_n(c, \sigma)_{\max} \Delta t / V_c$$

其中

- N : 網格中的模擬分子數
- \bar{N} : N 對時間或系統的平均值
- F_n : 模擬分子所代表的實際分子數
- V_c : 網格的體積

而每一碰撞對中的兩個分子由亂數取得，
步驟為：

1. 將網格中分子數乘上亂數函數，得到第
一個分子。
2. 找出第一個分子所在的子網格
(subcell)。
3. 將子網格中分子數乘上亂數函數，以取
得第二個分子。若此子網格中只有一個
分子，則照步驟 1 之方法取得第二個分
子。

其次，我們由碰撞機率來判定此分子對是
否碰撞，如下：

$$\frac{P}{P_{\max}} = \frac{c_r \sigma}{(c_r \sigma)_{\max}} \geq R_i$$

其中

- c_r : relative speed
- σ : total collision cross-section
- R_i : random function

若符合此條件則發生碰撞，否則不碰，繼
續處理下一個碰撞對。

VHS 分子模型

硬球模型 (Hard Sphere Model) 不
能模擬真實氣體行為，主要的因素在於碰
撞面積 (cross section) 隨碰撞粒子間相對
速度而改變，故本文採用 Bird 之 VHS 模
型以改善此一缺點，使有效分子直徑為碰
撞時相對能量的函數，而其中參考分子平
均直徑 d_{ref} ，參考溫度 T_{ref} 呈下列關係：

$$d_{ref} = \left[\frac{15(mkT_{ref}/\pi)^{1/2}}{2(5-2\omega)(7-2\omega)\mu_{ref}} \right]^{1/2} \quad (1)$$

實際分子直徑 d 與相對速度 c_r 之關係為：

$$d = d_{ref} \left\{ \frac{[2kT_{ref}/(m_r c_r^2)]^{\omega-1/2}}{\Gamma(5/2-\omega)} \right\}^{1/2} \quad (2)$$

而黏滯係數與參考溫度之關係為：

$$\mu_{ref} \propto T_{ref}^\omega$$

其中

- k : Boltzmann constant
- m_r : the reduced mass
- μ_{ref} : the coefficient of viscosity

當二分子(分子 a 與分子 b)碰撞時，我們可
經由上述(1)和(2)式，算得 d_a 、 d_b ，進而求
得碰撞截面積 σ_T (the total collision
cross-section)：

$$\sigma_T = \frac{\pi(d_a + d_b)^2}{4}$$

單原子分子模型

單原子分子氣體如氦等，自由度只有三個
平移自由度，沒有轉動與振動能，故碰撞
時其總能量 e 即等於移動能 e_t (translational
energy)，寫為：

$$e = e_t = \frac{1}{2} m_r c_r^2 = \frac{1}{2} m_r (c_r')^2 = e_t'$$

其中 $'$ 代表碰撞後狀態， c_r 為相對速度， m_r
為分子 a 與分子 b 的減縮質量

$$m_r = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b}$$

因碰撞未受外力干涉，故碰撞總能量不
變，即 e_t' 固定，為完全彈性碰撞，碰撞後
經由隨機單位向量(random unit vector) h' ，
重新分配 x, y, z 方向的相對速度以求得
各分子碰撞後速度，而其中 h'_x 分量为：

$$n'_x = 1 - 2R_1, \theta = 2\pi R_2$$

$$n'_y = (1 - n_x'^2)^{1/2} \cos \theta$$

$$n'_z = (1 - n_x'^2)^{1/2} \sin \theta$$

其中

R_i 為 random function (其值在 0~1 之間), 表示為 R_1, R_2, R_3, \dots

質量中心速度 \hat{c}_c 碰撞前後相同為:

$$\hat{c}_c = \hat{c}_c = \frac{m_a \hat{v}_a + m_b \hat{v}_b}{m_a + m_b} = \frac{m_a}{m_b} \hat{v}_a + \frac{m_b}{m_a} \hat{v}_b \quad (3)$$

故碰撞後速度為:

$$\hat{v}_a' = \hat{c}_c - (m_b / m_a) \hat{c}_c' \quad (4)$$

$$\hat{v}_b' = \hat{c}_c + (m_a / m_b) \hat{c}_c' \quad (5)$$

雙原子分子模型

雙原子分子氣體如氧, 氮等, 除了三個平移自由度外, 還有二個轉動自由度, 而高溫時尚有振動的自由度, 所以當考慮雙原子分子模型時, 其碰撞總能量 e 可分成移動能 e_t 與內能(internal energy) e_i 兩部份, 寫成:

$$e = e_t + e_i = e_t' + e_i'$$

$$e_t = \frac{1}{2} m_r c_r^2$$

$$e_i = \frac{1}{2} m_r c_r'^2$$

其中 e_t 仍與前節所述相同, 但 $e_t \neq e_t'$, 而 e_i 即代表碰撞對轉動與振動能之和, 亦為分子 a 和分子 b 內能之和:

$$e_i = e_{i_a} + e_{i_b}$$

$$e_i' = e_{i_a}' + e_{i_b}'$$

上式表示碰撞時移動能與內能有某程度的轉換, 亦即非完全彈性碰撞, 故我們若能得知碰撞後移動能 e_t' 與內能 e_i' 的分配比例, 便可獲得碰撞後相對速度 c_r' , 再如前節所述算得分子碰撞後速度 \hat{v}_a' , \hat{v}_b' 。

其次, 我們必須知道碰撞後內能 e_i' 如何分配至分子 a 和分子 b, 當 e_{i_a}' 與 e_{i_b}' 確定後, 整個碰撞過程就算完成, 可以準備進行下一次碰撞。而上述之能量分配過程, 我們採用 Larsen-Borgnakke model[44], 這個方法可輕易地套用在 VHS 模型, 如下:

$$P_{e_i'} = \left[\left(\frac{x+\eta-1}{\eta} \right) \left(\frac{e_i'}{e} \right) \right]^\eta \left[\left(\frac{x+\eta-1}{x-1} \right) \left(1 - \frac{e_i'}{e} \right) \right]^{x-1} \quad (6)$$

其中

$$\eta = \frac{\nu-3}{\nu-1}$$

ν : exponent of inverse power law molecular force

x : degree of freedom

當 $e_i' = R_3 e$ 代入(6)時, 若 $P_{e_i'} \geq R_4$, 即取 $e_i' = R_3 e$, 否則再重取一次 e_i' , 直到滿足

$$P_{e_i'}(e_i' = R_3 e) > R_{n+1}$$

此即為 acceptance-rejection technique, 而得到 e_i' 後, 我們便可知

$$e_t' = e - e_i'$$

再應用一次 acceptance-rejection technique

$$P_{e_{i_a}'} = 2^{x-2} \left[\frac{e_{i_a}'}{e_i'} \left(1 - \frac{e_{i_a}'}{e_i'} \right) \right]^{x-1} \quad (7)$$

當 $e_{i_a}' = R_5 e_i'$ 代入(7), 若 $P_{e_{i_a}'} \geq R_6$, 即取 $e_{i_a}' = R_5 e_i'$, 否則再重取一次 e_{i_a}' , 直到滿足

$$P_{e_{i_a}'}(e_{i_a}' = R_5 e_i') \geq R_{n+1}$$

而得到 e_{i_a}' 後, 我們便可知

$$e_{i_b}' = e_i' - e_{i_a}'$$

經過上述計算, 可得 e_t' 、 e_{i_a}' 、 e_{i_b}' , 故

$$c_r' = \left(\frac{2e_t'}{m_r} \right)^{1/2}$$

$$\hat{c}_c' = c_r' \hat{R}$$

\hat{R} 為前所述之隨機單位向量, 而再由(3)、(4)、(5)式即可獲得 \hat{v}_a' 、 \hat{v}_b' 。

因此, 經 Larsen-Borgnakke model, 我們可由 \hat{v}_a 、 \hat{v}_b 、 e_{i_a} 、 e_{i_b} 得到 \hat{v}_a' 、 \hat{v}_b' 、 e_{i_a}' 、 e_{i_b}' 。

DSMC 法中的動量脈動相關函數及機率密度函數

分子氣體動力論推導出來的波茲曼方程式本質上亦是要解一 pdf 方程式。當利用 DSMC 法模擬時, 除了可得到此 pdf 外, 亦可同時得到其各個重力矩而不需額外的計算, 即不需借助 pdf。

因 DSMC 法乃是以模擬分子的粒子在計算域中移動而統計其變化, 計算過程中並記錄了其每個單位時間間隔後的速度分量, 故在一定的精確度之內, 我們可將出現在一網格內每個粒子表現出的性質視為真實流場之亂度情形, 並以下列公式計算每個網格中各項性質之平均值:

$$\overline{u_i' u_j'} = \overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j}$$

$$\overline{u_i'^2 u_j'} = \overline{u_i^2 u_j} - 2 \overline{u_i} \overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j^2} + 2 \overline{u_i} \overline{u_j}$$

$$\overline{u_i'^4} = \overline{u_i^4} - 4 \overline{u_i} \overline{u_i^3} + 6 \overline{u_i}^2 \overline{u_i^2} - 3 \overline{u_i}^4$$

其中

下標 i 、 j : 1~3, 表示座標軸的三個方向

上標 $\bar{\quad}$: 表示相對流場平均速度之脈動速度

上方 $\overline{\quad}$: 表示對所有位於此網格之模擬粒子作平均

除了上述各項性質平均值外, 並將進一步統計出混合區域內各級一點速度脈動機率

密度函數及聯合機率密度函數。

本文欲觀察的分別是：

二階動量中的 $\overline{u'v'}$ 、 $\overline{u't'}$ 、 $\overline{v't'}$ 、 $\overline{u'^2}$ 、 $\overline{v'^2}$ 、 $\overline{w'^2}$ 及後三者之和。

三階動量中的 $\overline{u'^2v'}$ 、 $\overline{u'^3}$ 、 $\overline{v'^3}$ 。

四階動量中的 $\overline{u'^4}$ 、 $\overline{v'^4}$ 。

速度脈動機率密度函數 $f(u')$ 、 $f(v')$ 、 $f(w')$ 。

溫度脈動機率密度函數 $f(t')$

聯合機率密度函數 $f(u',v')$ 。

其個別代表的意義如下：

\overline{uv} ：相應於連性流中之雷諾應力 (Reynold stress)。因其本身常為負值，故習慣在前面加上一負號。

$\overline{u'^2}$ 、 $\overline{v'^2}$ 、 $\overline{w'^2}$ ：在連性流中分別表示速度脈動在 x、y、z 三個方向上的正向應力(即壓力)。若由統計觀點視之，此三項則代表了 u' 、 v' 、 w' 分佈函數之變異值(即標準差平方)。此三項之和則表示速度脈動的能量。

$\overline{u'^2v'}$ ：表示 x 方向上的脈動能量在 y 方向上的傳遞。

$\overline{u'^3}$ 和 $\overline{v'^3}$ ：若分別對 u' 、 v' 分佈函數標準差之三次方作無因次化則稱為 skewness，分別表示 u' 和 v' 分佈的對稱情形。

$\overline{u'^4}$ 和 $\overline{v'^4}$ ：若分別對 u' 、 v' 分佈函數標準差之四次方作無因次化則稱為 flatness 或 kurtosis，各表示 u' 和 v' 分佈的平滑程度。

$f(u')$ ：代表 x 方向速度脈動 u' 之機率密度函數。

$f(v')$ ：代表 y 方向速度脈動 v' 之機率密度函數。

$f(w')$ ：代表 z 方向速度脈動 w' 之機率密度函數。

$f(u',v')$ ：代表 x 方向速度脈動 u' 與 y 方向速度脈動 v' 之聯合機率密度函數。

四、結果與討論

圖(1)為二維稀薄氣體自由剪力流之示意圖。自由流乃模擬距海平面 109.75 公里高度下之大氣特性，為了模擬方便，上

層高速自由流為氧，而下層低速自由流為氮。計算域為高 8 公尺(兩種自由流由左方邊界進入，各佔一半高度)，長 12 公尺之矩形區域。本文採用方形網格，並將流場分為對等之上下兩部分，其上半部為自由流流速較高者。自由流由左邊界進入後流向右邊界，定此方向為 x 軸的方向。以雙原子分子模型計算之，自由流之初始狀態列於表一。

直接模擬蒙地卡羅法可有效的應用於 $0.1 < Kn < 10$ 時[32]，本文是以速度邊界層延伸回 $x=0$ 處時的厚度作為特徵長度，所得到的 Kn 值為 0.23。

附圖之長度單位皆對自由流平均自由徑 λ_0 作無因次化，而溫度、密度、壓力對自由流之 T_0 、 ρ_0 、 p_0 作無因次化，速度則是以自由流溫度下之音速作無因次化，速度脈動相關函數則一律以自由流溫度下音速之相應因次作無因次化。至於速度、溫度脈動機率密度函數，將以標準差距 σ_x 為座標軸($\sigma_x = [\overline{x^2}]^{1/2}$ 其中 x 分別為 u' 、 v' 及 w')。

圖(2-5)為速度比 0.6 時之流場性質。圖(6-7)為速度比 1 時之莫耳分率分佈圖與密度分佈圖。由圖(6-7)可看到即使沒有了速度差，依然有混合層的存在。

圖(8-12)為同一截面上， η 分別為 -0.28、-0.12、-0.04、0 以及 0.04，氮之濃度機率密度函數，由圖中可觀察到在混合層中的機率密度函數 $f(c'_{N2})$ 偏離了高斯分佈，而離混合層較遠處之 $f(c'_{N2})$ 則會與高斯分佈較為相近。而且這些在混合層中的機率密度函數 $f(c'_{N2})$ 分佈圖，則呈現雙峰(bimodal)的外型，這顯示出混合層中的紊性現象是來自於兩不同流速自由流之交互作用。

圖(13-17)是為同一截面上， η 分別為 0.28、0.12、0.04、0 以及 -0.04，氧之濃度機率密度函數，由圖中可觀察到在混合層中的機率密度函數 $f(c'_{O2})$ 偏離了高斯分佈，而離混合層較遠處之 $f(c'_{O2})$ 則會與高斯分佈較為相近。比較圖(14)、(18)與(19)可發現越往下游流場，機率密度函數 $f(c'_{O2})$ 分佈圖越趨近於高斯分佈。

圖(20-24)是同一截面上， η 分別為 -0.28、-0.12、-0.04、0 以及 0.04 之聯合機率密度函數 $f(c'_{N2}, v')$ 分佈。由圖中可看

到混合層中之 $f(c'_{N_2}, v')$ 明顯的偏離高斯分佈，而離混合層越遠則 $f(c'_{N_2}, v')$ 越接近高斯分佈，這是因為混合層中之紊性相關值較強。

比較圖(25)與圖(20-24)，可看出當 $f(c'_{N_2}, v')$ 分佈接近高斯分佈時，其相對的 $\overline{v'c'_{N_2}}$ 相關值較弱；而當 $f(c'_{N_2}, v')$ 分佈偏離高斯分佈時，其相對之 $\overline{v'c'_{N_2}}$ 相關值較強。另外由圖(22)可看到 $f(c'_{N_2}, v')$ 分佈偏向負的 c' 與負的 v' ，故 $\overline{v'c'_{N_2}}$ 相關值為正值。

圖(25)為 $\overline{v'c'_{N_2}}$ 相關值於流場各截面上之分佈圖，而圖(26)為 $\overline{v'c'_{O_2}}$ 相關值於流場各截面上之分佈圖，由圖(25)中可見氮分子在混合層中，由下層自由流往混合層中心傳遞，過了混合層中心，變成往下傳遞，不過其值小多了。另外於圖(26)可見氧分子在混合層中，由上層自由流往混合層中心傳遞，過了混合層中心，變成往上傳遞，不過其值小多了。

五、結論

於本文中我們成功的計算了 $\overline{v'c'_{N_2}}$ 、 $\overline{v'c'_{O_2}}$ 、 $f(c_{O_2}')$ 、 $f(c_{N_2}')$ 以及 $f(c_{O_2}', v')$ 和 $f(c_{N_2}', v')$ 。並且發現在速度比為 1 時，流場還是有混合層產生。另外觀察到下層氮分子在混合層中往上傳遞，而上層氧分子在混合層中往下傳遞。

六、參考文獻

[1] Tollmien, W., 1926, "Berechnung Turbulenter Ausbreitungsvorgänge," *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, Vol. 6, pp. 468-478.

[2] Gortler, H., 1942, "Berechnung von Aufgaben der freien Turbulenz auf Grund eines neuen Näherungsansatzes," *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, Vol. 22, pp. 244-254.

[3] Lee, S. C., and Harsha, P. T., 1970, "Use of Turbulent Kinetic Energy in Free Mixing Studies," *AIAA Journal*, Vol. 8, No. 6, pp. 1026-1032.

[4] Spencer, B. W., and Jones, B. C., 1971, "Statistical Investigation of Pressure and Velocity Fields in the Turbulent Two-stream Mixing Layer," *AIAA paper* 71-613.

[5] Jones, I. S. F., 1976, "The Maintenance of

Turbulent Shear Stress in a Mixing Layer," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 74, pp. 269-295.

[6] Mohammadian, S., Saiy, M., and Peorless, S. J., 1976, "Fluid Mixing with Unequal Free-stream Turbulence Intensities," *ASME JOURNAL OF FLUIDS ENGINEERING*, pp. 229-242.

[7] Batt, R. G., 1977, "Turbulent Mixing of Passive and Chemically Reacting Species in a low-Speed Shear Layer," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 82, pp. 53-95.

[8] Hong, Z. C., 1975, "Turbulent Reacting Flows According to a Kinetic Theory," Ph.D. thesis, university of Illinois.

[9] Bywater, R. J., 1981, "Velocity Space Description of Certain Turbulent Free Shear Flow Characteristics," *AIAA Journal*, Vol. 19, No. 8, pp. 969-975.

[10] Hong, Z. C., and lai, Z. C., 1983, "On the Mixing Analysis of a Free Turbulence Shear Layer," *The Chinese Journal of Mechanics*, Vol. 1, No. 1, pp. 25-33.

[11] Haworth, D. C., and Pope, S. B., 1986, "A Generalized Langevin Model for Turbulent Free Shear Flows," *Physics of Fluids*, Vol. 29, pp. 387-405.

[12] Haworth, D. C., and Pope, S. B., 1987, "A pdf Modeling Study of Self-similar Turbulent Free Shear Flows," *Physics of Fluids*, Vol. 30, pp. 1026-1044.

[13] Pope, S. B., 1991, "Application of the Velocity-dissipation Probability Density Function Model to Inhomogeneous Turbulent Flows," *Physics of Fluids A*, Vol. 3, pp. 1947-1957.

[14] Sandham, N. D., and Reynold, W. C., 1990, "Compressible Mixing Layer: Linear Theory and Direct Simulation," *AIAA Journal*, Vol. 28, pp. 618-624.

[15] Tang, w., Komerath, N. M., and Sankar, L. N., 1990, "Numerical Simulation of the Growth of Instabilities in Supersonic Free Shear Layers," *Journal of Propulsion Power*, Vol. 6, pp. 455-460.

[16] Drummond, J. P., Carpenter, M. H., and Riggins, D. W., 1991, "Mixing and Mixing Enhancement in Supersonic Reacting Flowfields," In *Progress in Astronautics and Aeronautics*, Vol. 137: *High-Speed Flight Propulsion Systems* (ed. S. N. B. Murthy and E. T. Curran) pp. 383-455. AIAA.

[17] Chinzei, N., Masuya, G., Komuro, T., Murakami, A., and Kudou, K., 1986, "Spreading of Two-stream Supersonic Turbulent Mixing Layers," *Physics of Fluids*, Vol. 29, pp. 1345-1347.

[18] Papamoschou, D., and Roshko, A., 1988, "The Compressible Turbulent Shear Layer: an Experimental Study," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 1987, pp. 453-477.

[19] Goebel, S. G., and Dutton, J. C., 1991, "Experimental Study of Compressible

- Turbulent Mixing Layers,” *AIAA Journal*, Vol. 29, pp. 538-546.
- [20] Elliott, G. S., Samimy, M., and Arnette, S. A., 1992, “Study of Compressible Mixing Layers Using Filtered Rayleigh Scattering Based Visualizations,” *AIAA Journal*, Vol. 30, pp. 2567-2569.
- [21] Clemens, N. T., and Mungal, M. G., 1995, “Large-scale Structure and Entrainment in the Supersonic Mixing Layer,” *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 284, pp. 171-216.
- [22] Buttsworth, D. R., Morgan, R. G., and Jones, T. V., 1995, “A Gun Tunnel Investigation of Hypersonic Free Shear Layers in a Planar Duct,” *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 299, pp. 133-152.
- [23] LeBeau, G. J., and Lumpkin III, F. E., 2001, “Application Highlights of the DSMC Analysis Code (DAC) Software for Simulating Rarefied Flows,” *Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 191, pp. 595-609.
- [24] Bird, G. A., 1994, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Oxford, UK: Clarendon.
- [25] Bird, G. A., 1978, “Monte Carlo Simulation of Gas Flows,” *Ann. Rev. Fluid Mech.* Vol. 10, pp. 11-31.
- [26] Bird, G. A., 1963, “Approach to Translational Equilibrium in a Rigid Sphere Gas,” *Phys. Fluids* Vol. 6, pp. 1518-1519.
- [27] Bird, G. A., 1976, *Molecular Gas Dynamics*, Oxford, UK: Clarendon.
- [28] Bird, G. A., 1978, “Monte Carlo Simulation of Gas Flows,” *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 10, pp. 11-31.
- [29] Muntz, E. P., 1989, “Rarefied Gas Dynamics,” *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 21, pp. 387-417.
- [30] Cheng, H. K., 1993, “Perspectives on Hypersonic Viscous Flow Research,” *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 25, pp. 455-484.
- [31] Cheng, H. K. and Emmanuel, G., 1995, “Perspectives on Hypersonic Nonequilibrium Flow,” *AIAA Journal*, Vol. 33, pp. 385-400.
- [32] Oran E. S., Oh, C. K. and Cybyk, B. Z., 1998, “Direct Simulation Monte Carlo: Recent Advances and Applications,” *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 30, pp. 403-441.
- [33] Bird, G. A., 1998, “Recent Advances and Current Challenges for DSMC,” *Comput. Math. Appl.*, Vol. 35, pp. 1-14.
- [34] Nance R. P. and Hassan H. A., 1997, “Role of Boundary Conditions in Monte Carlo Simulation of MEMS Devices,” *AIAA paper 97-0375*.
- [35] Fan, J. and Shen, C., 1998, “Statistical Simulation of Low-speed Unidirectional Flows in Transitional Region,” *21st Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics* (Marseilles, France).
- [36] Cai, C. P., Boyd, I. D., Fan, J. and Candler, G. V., 2000, “Direct Simulation Methods for Low-speed Microchannel Flows,” *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 14, No. 3, pp. 368-378.
- [37] Pan, L. S., Ng, T. Y. and Lam, K. Y., 2001, “Molecular Block Model Direct Simulation Monte Carlo Method for Low Velocity Microgas Flows,” *Journal of Micromechanics and Microengineering*, Vol. 11, pp. 181-188.
- [38] Bird, G. A., 1967, “The Velocity Distribution Function Within a Shock Wave,” *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 30, part 3, pp. 479-487.
- [39] Pham-Van-Diep G., Erwin, D. and Muntz, E. P., 1989, “Nonequilibrium Molecular Motion in a Hypersonic Shock Wave,” *Science*, Vol. 245, pp. 624-626.
- [40] Stefanov, S. K., Boyd, L. D. and Cai, C. P., 2000, “Monte Carlo Analysis of Macroscopic Fluctuations in Rarefied Hypersonic Flow Around a Cylinder,” *Phys. of fluids*, Vol. 12, No. 5, pp.1226-1239.
- [41] 歐陽堅, 1992, "二維鈍體極音速流場氣體動力分析," 國立中央大學機械研究所碩士論文.
- [42] 李威龍, 1994, "鈍體極音速稀薄氣體流場分析," 國立中央大學機械研究所碩士論文.
- [43] 洪祖昌, 傅維安, 杜文謙, 1998, “稀薄氣體自由剪力層中動量關函數之探討,” *中國航空太空學會會刊*, Vol. 30, No. 1, pp. 77-86.
- [44] Borgnakke Claus and Larsen Poul S., 1975, "Statistical Collision Model for Monte Carlo Simulation of Polyatomic Gas Mixture," *J. Comput. Phys.* 18.

表 1. 自由流之初始狀態

Free stream	The upper free stream(O2)	The lower free stream(N2)
Mach number (Velocity ratio = 1)	20	20
Mach number (Velocity ratio = 0.6)	20	12
Temperature	273 K	273 K
Speed of sound	314 m/s	336.8 m/s
The most probable velocity	376.5 m/s	402.5 m/s
The number density of molecules	$1.0e20 \text{ m}^{-3}$	$1.0e20 \text{ m}^{-3}$
Density	$5.31e-6 \text{ kg/m}^3$	$4.65e-6 \text{ kg/m}^3$
Concentration	$1.66e-7 \text{ kmol/m}^3$	$1.66e-7 \text{ kmol/m}^3$
Mean free path	$1.35e-2 \text{ m}$	$1.29e-2 \text{ m}$

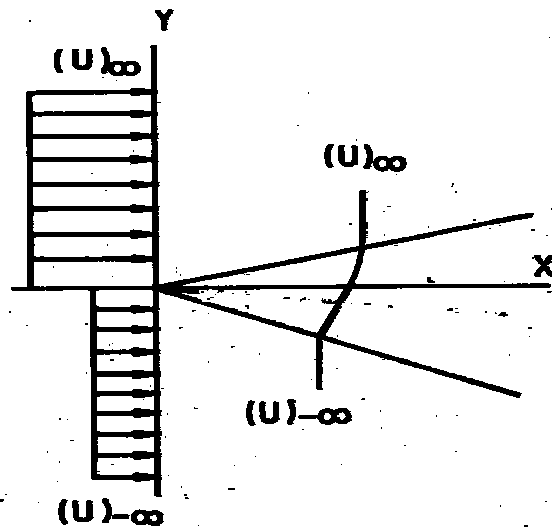


圖 1. 自由剪力流流場示意圖

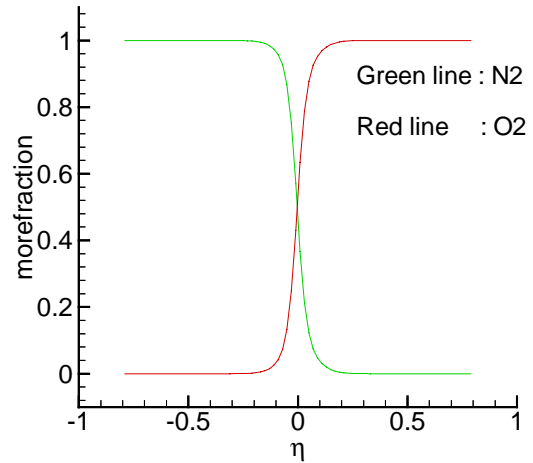


圖 2. 速度比 0.6 之流場中粒子莫耳分率分佈圖

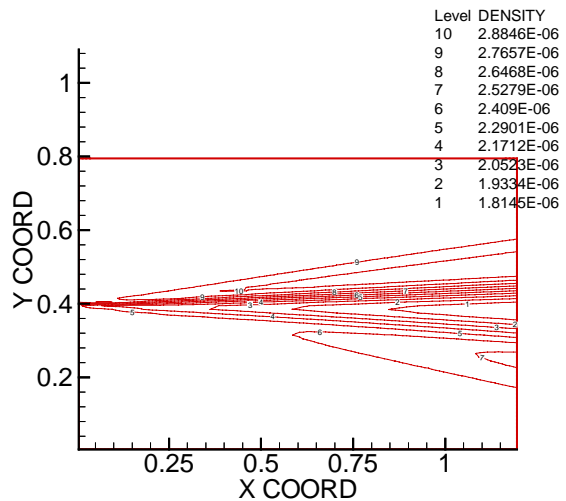


圖 3. 速度比 0.6 之流場密度分佈圖

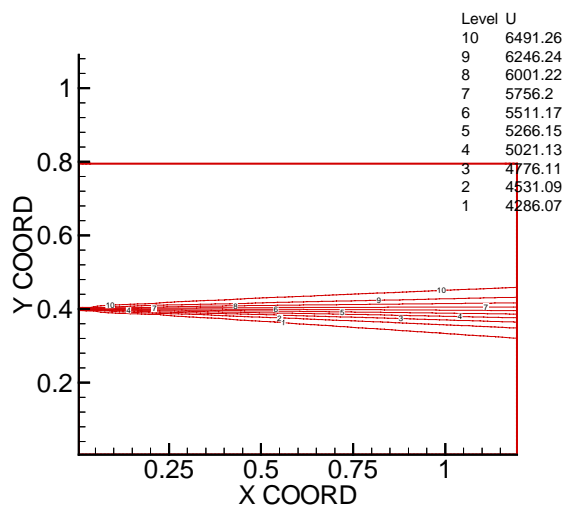


圖 4. 速度比 0.6 之流場速度分佈圖

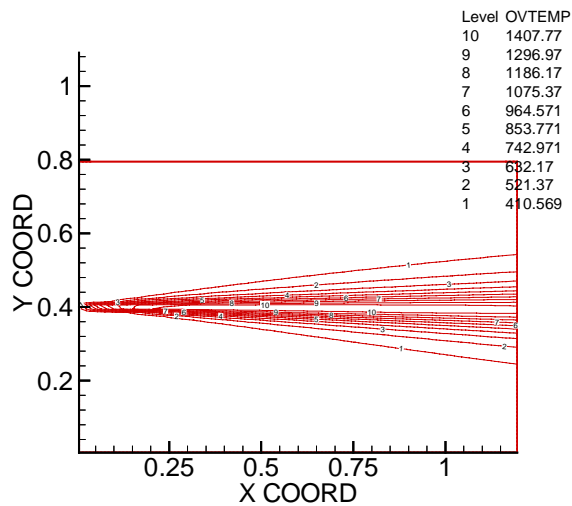


圖 5. 速度比 0.6 之流場溫度分佈圖

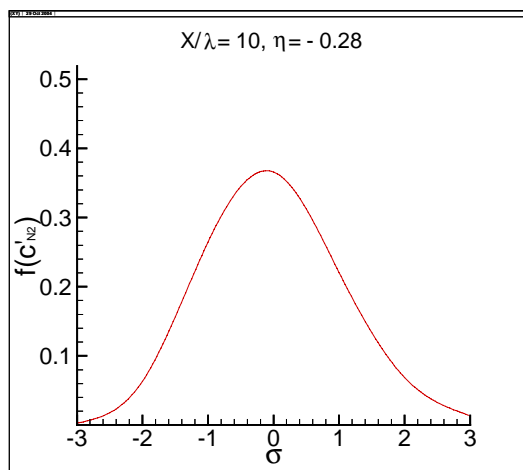


圖 8. $f(c'_{N2})$, $x/\lambda = 10$, $\eta = -0.28$, 速度比為 0.6

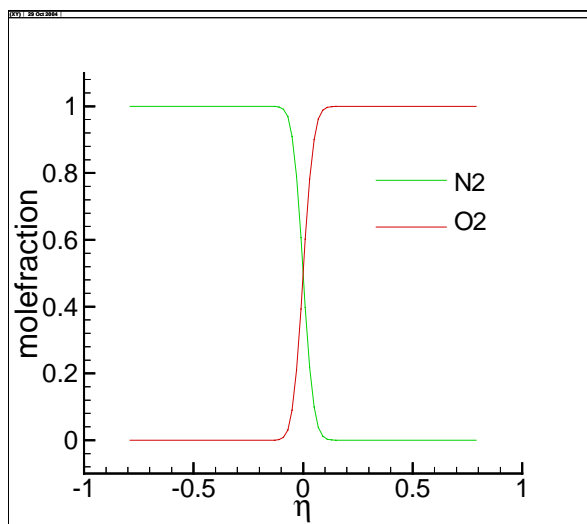


圖 6. 速度比 1 之流場中粒子莫耳分率分佈圖

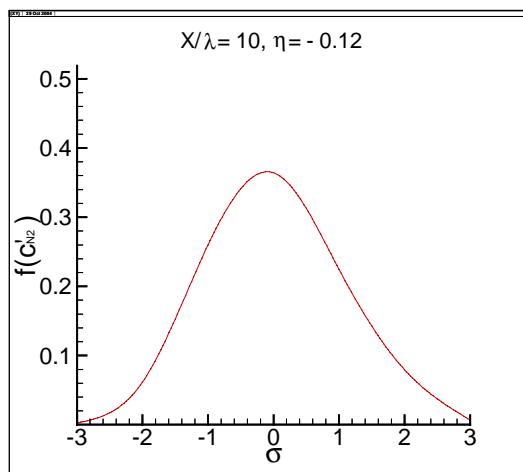


圖 9. $f(c'_{N2})$, $x/\lambda = 10$, $\eta = -0.12$, 速度比為 0.6

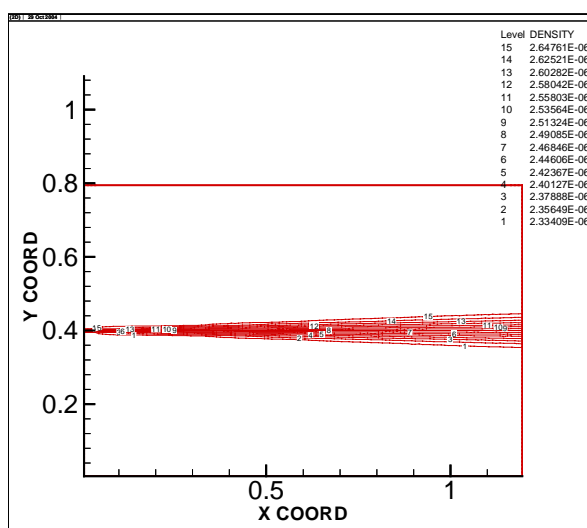


圖 7. 速度比 1 之流場密度分佈圖

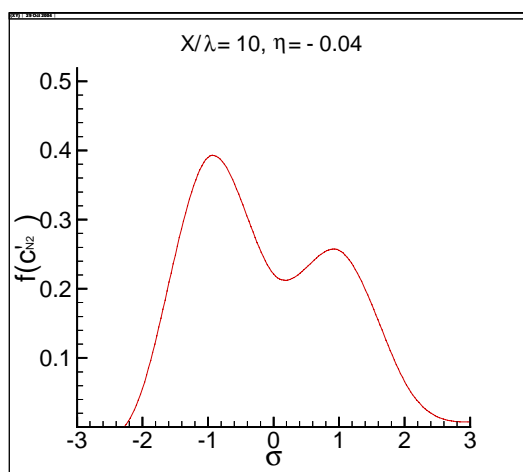


圖 10. $f(c'_{N2})$, $x/\lambda = 10$, $\eta = -0.04$, 速度比為 0.6

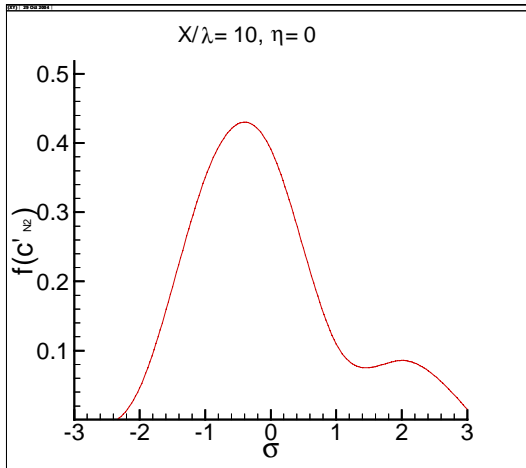


圖 11. $f(c'_{N2}), x/\lambda=10, \eta=0$, 速度比為 0.6

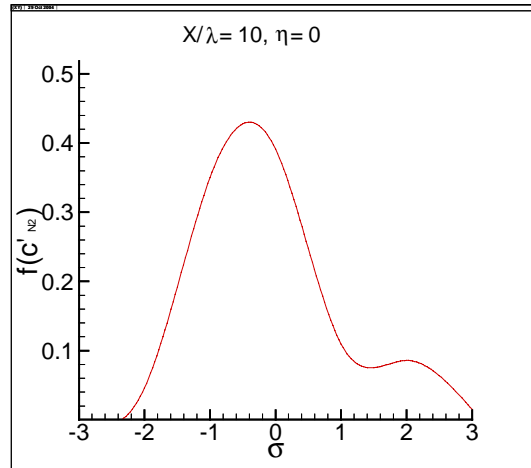


圖 14. $f(c'_{O2}), x/\lambda=10, \eta=0$, 速度比為 0.6

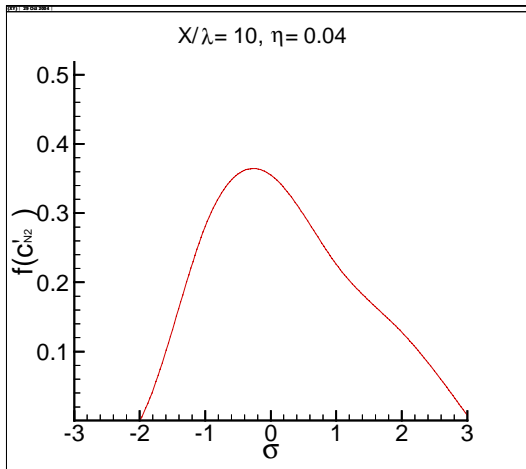


圖 12. $f(c'_{N2}), x/\lambda=10, \eta=0.04$, 速度比為 0.6

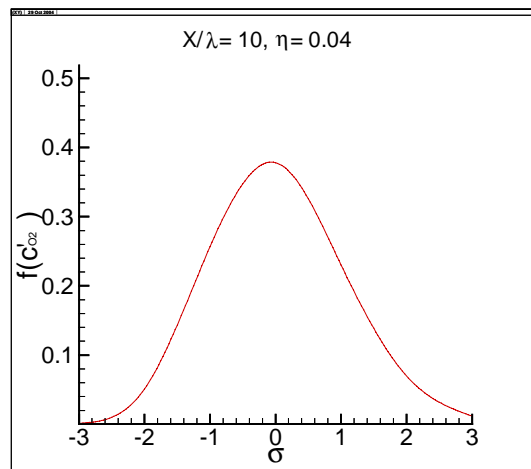


圖 15. $f(c'_{O2}), x/\lambda=10, \eta=0.04$, 速度比為 0.6

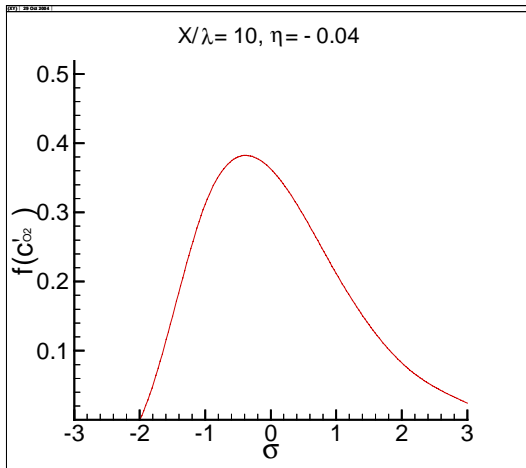


圖 13. $f(c'_{O2}), x/\lambda=10, \eta=0.04$, 速度比為 0.6

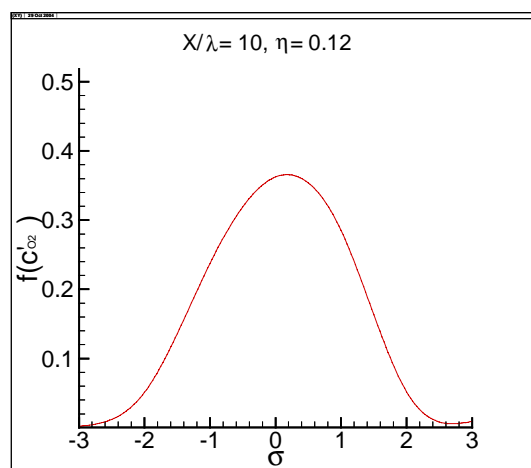


圖 16. $f(c'_{O2}), x/\lambda=10, \eta=0.12$, 速度比為 0.6

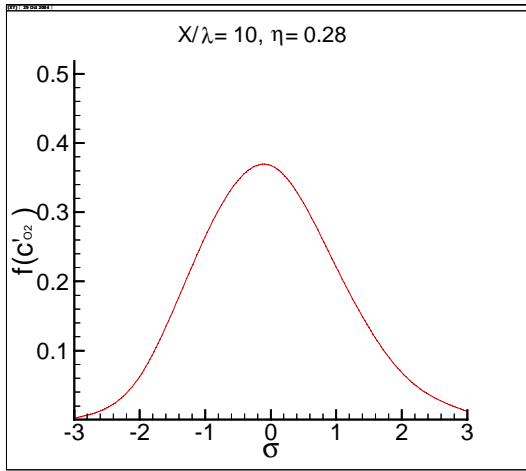


圖 17. $f(c'_{oz})$, $x/\lambda=10$, $\eta=0.28$, 速度比為 0.6

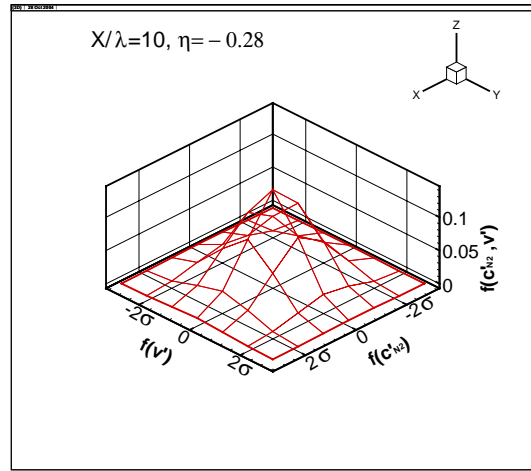


圖 20. $f(c'_{vz}, v')$ 分佈圖, $x/\lambda=10$, $\eta=-0.28$

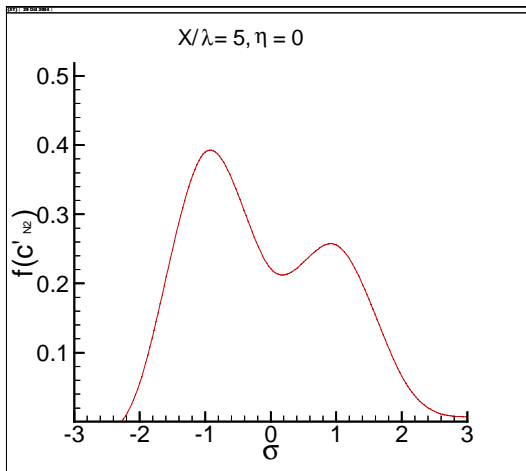


圖 18. $f(c'_{vz})$, $x/\lambda=5$, $\eta=0$, 速度比為 0.6

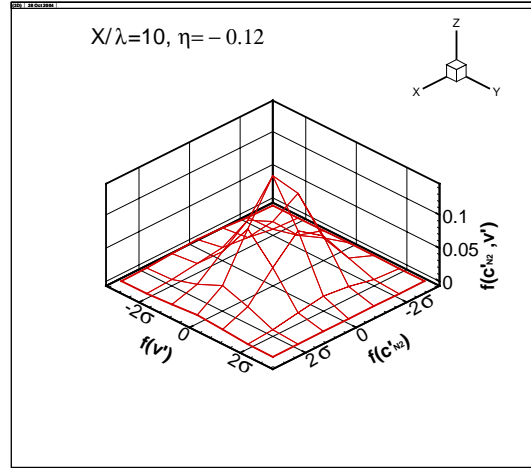


圖 21. $f(c'_{vz}, v')$ 分佈圖, $x/\lambda=10$, $\eta=-0.12$

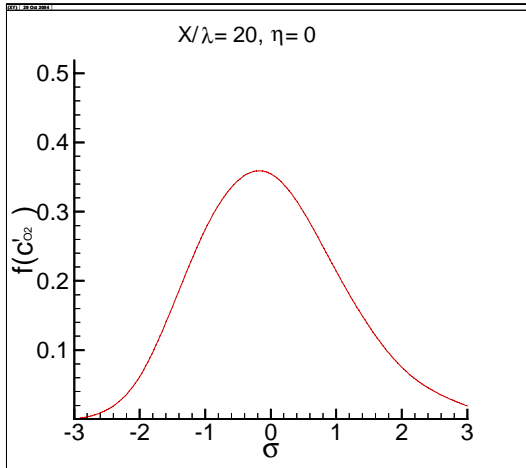


圖 19. $f(c'_{oz})$, $x/\lambda=20$, $\eta=0$, 速度比為 0.6

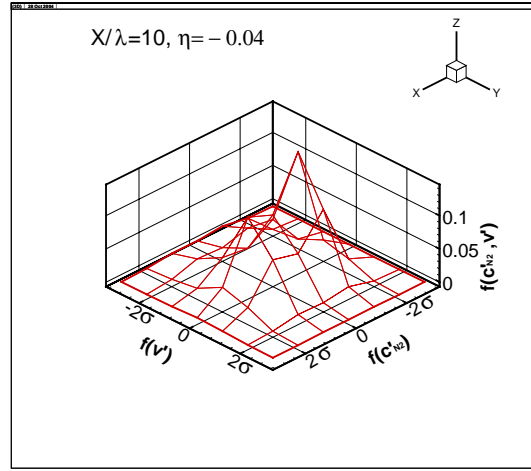


圖 22. $f(c'_{vz}, v')$ 分佈圖, $x/\lambda=10$, $\eta=-0.04$

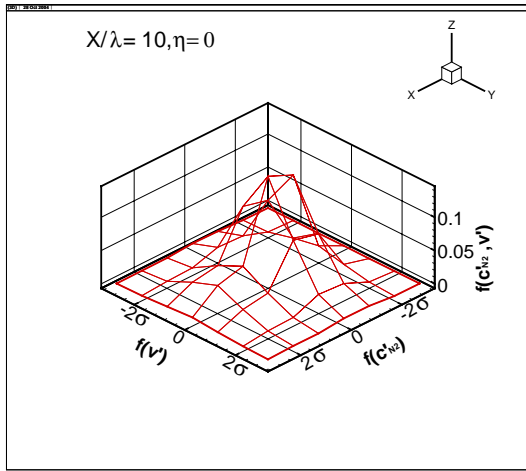


圖 23. $f(c'_{N2}, v')$ 分佈圖, $x/\lambda=10, \eta=0$

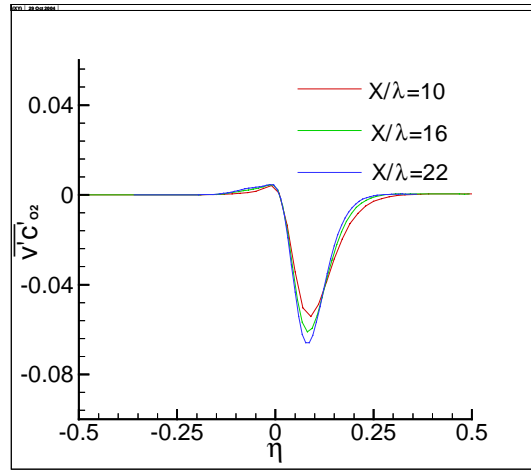


圖 26. 流場各截面之 $\overline{v'c'_{O2}}$ 分佈圖

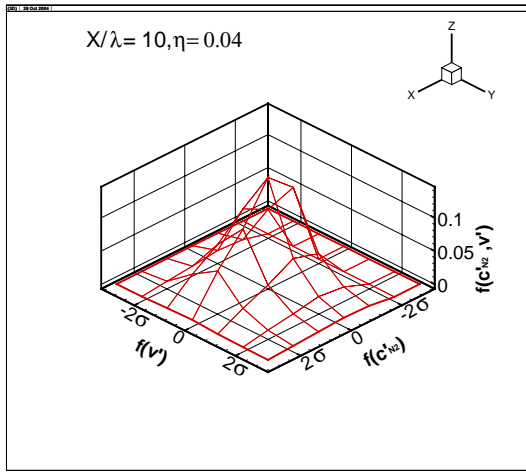


圖 24. $f(c'_{N2}, v')$ 分佈圖, $x/\lambda=10, \eta=0.04$

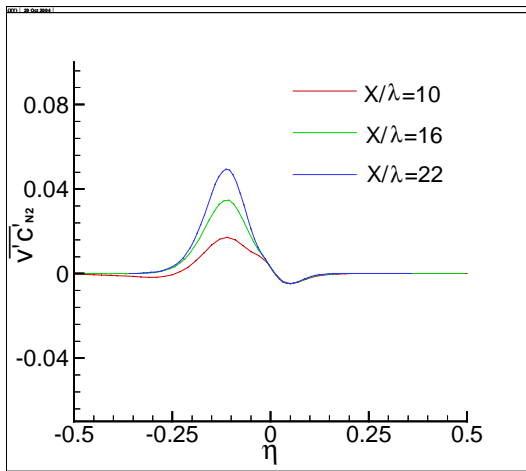


圖 25. 流場各截面之 $\overline{v'c'_{N2}}$ 分佈圖

