

dsmcFOAM+模擬結果與模擬粒子數目之比較

黃柏瑞

國立台灣大學機械工程學系

摘要

這篇報告目的是討論 dsmcFOAM+在計算時模擬的粒子數目，在逐次減少時對模擬結果有怎麼樣的影響。由於我們需要判定模擬結果的確是可以拿來探討的，我們使用法國 CNRS 的 MARHy 風洞所進行的實驗作為 dsmc 模擬的情境，並計畫對比實驗數據與模擬生成的數據來討論「隨模擬粒子數目減少，對模擬結果的影響程度為何」。在模擬過程中，由於沒有精確的，判斷計算收斂的判據，我們在人工判斷計算的趨勢沒有太大的變化時，紀錄並計算 stagnation pressure 隨 y 軸分布的資料點與實驗結果資料點的標準差，並表列這個標準差隨「模擬粒子數目減少」的趨勢。

關鍵字 — OPENFOAM、dsmcFoamPlus、MARHy

I. 前言

與上學期一樣，由於我未來規劃以 dsmcFOAM 等工具進行專題課程，因此我先使用真實的實驗與模擬結果進行對比，以確保我對該求解器的參數設定與相關理解足夠讓我利用他產生一組夠準確的結果，以避免 garbage in garbage out 的窘境。

由於 dsmc 耗時巨大，並且消耗不少計算資源，我想知道模擬粒子數對計算的影響。因為雖然理論上粒子數越多越好，但是由於個人電腦能力有限，在本身能力允許的情況下，我想要有一個取捨的依據，讓我了解我的模擬粒子數至少需要有多少，這也有助於我未來專題的研究。

在搜尋了有關稀薄流場的相關實驗論文後，我決定採用 Nicolas Rembaut et al. 做的實驗¹，該實驗目的是探討太空中的「碎削」掉進地球時與大氣層外層的互動，並且使用 MARHy 風洞對一系列球體以不同氣壓與速度進行吹拂，並觀察造成的震波。由於文中附上豐富的實驗數據，我決定採用上述實驗的環境與結果來進行 dsmc 方法的模擬。

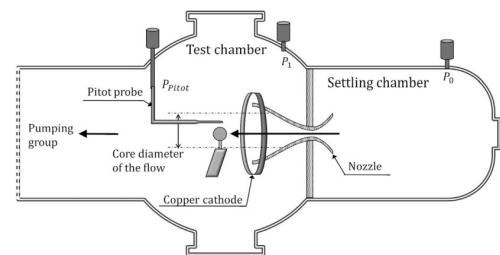
最後，由於要模擬球體，我希望使用 axisymmetric 的計算方法來減少計算量，因此採用 C.White et al. 所發展的 dsmcFoam+求解器²，該求解器提供求解 axisymmetric 問題的功能，這是標準 dsmcFoam 所欠缺的。

II. 研究方法

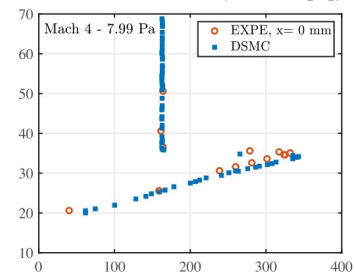
A. 實驗架設與數據¹

Nicolas Rembaut et al. 使用 MARHy 進行相關的實驗，MARHy 擁有兩個倉室，中間有一組噴嘴，開啟時較高壓的倉室會讓氣流透過噴嘴到達另一個倉室，在噴嘴出口會擺上要測試的模型，並透過倉室的窗口進行觀察。在其中一次實驗中的模型是一顆半徑 20mm 的球體，流場環境為流體靜壓 7.99Pa、流速 670m/s 以及溫度 69.76K，並且利用皮託管測量流體 stagnation pressure 隨垂直方向高度的變化，並在縱向位置於球體中心，中心前 8 毫米以及中心後

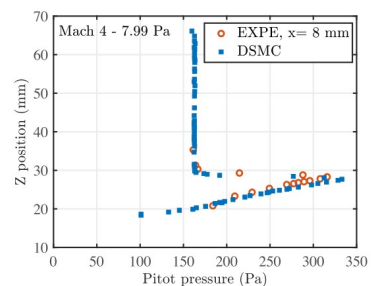
五毫米處進行這樣的測量。實驗者也以 DSMC 模擬程式 DS2V 對結果進行驗證，並在圖二、圖三中對兩者的結果進行對比。



圖一：實驗設置 (拷貝自[1])



圖二：縱向位置於球體中心的皮託管測量結果 (拷貝自[1])



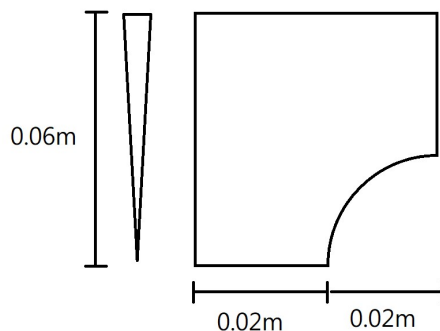
圖三：縱向位置於中心前 8 毫米的皮託管測量結果 (拷貝自[1])

B. 模擬情境

我們採用 Nicolas Rembaut et al. 所做的其中一組實驗的流場情境：在一顆半徑 20mm 的球體周圍有靜壓 7.99Pa、670 m/s、69.76K (4 馬赫) 的空氣氣流流過，我們並且補足文中所沒有提到的變數，包括假設球體溫度也是 69.76 K，最後假設熱熔比值 $\gamma=1.4$ 、空氣組成為 N_2 (77.7%) 以及 O_2 (22.3%)，並且 rotational degree of freedom = 2。

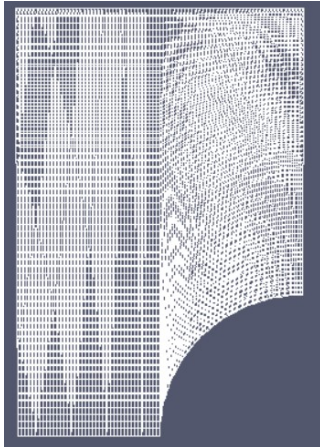
C. 以 blockMesh 進行網格劃分

由於考慮個人電腦的計算能力，我們僅模擬流場的前半部，也就是前半顆球，並且由於流場是軸對稱的，我們僅須創造一個楔型的模擬空間，應求解器要求，楔型需要是銳角五度的等腰三角形，具體尺寸如下：



圖四：模擬的空間

網格生成方面，我們將空間在垂直方向切成 40 格網格，並在水平方向切成 80 格，成果如下：



圖五：blockMesh 結果

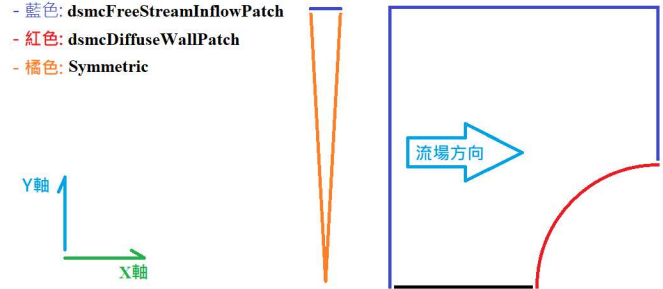
D. dsmcFoamPlus 模擬

就邊界條件而言，我們將模擬空間的左、上與右邊界劃為 dsmcFreeStreamInflowPatch：

- translational temperature = 69.76K
- rotational temperature = 69.76K
- velocity = (670 0 0)
- N_2 number density = $6.45e21$
- O_2 number density = $1.85e21$

球體表面劃為 dsmcDiffuseWallPatch：

- temperature = 69.76K
- velocity = (0 0 0)



圖六：邊界條件之設定

求解器本身的設定如下：

- maxRadialWeightingFactor = 1000
- collisionPartnerSelectionModel = onTimeCounter
- BinaryCollisionModel = LarsenBorgnakkeVariableHardSphere

另外該求解器並沒有實作除 diffuse wall 以外的 particle-wall interact model，這代表模擬過程的 accommodation parameters 應該為 1。

我們另外將每顆 dsmc 粒子所代表的實際粒子數調整為 $2e8$ 、 $2e9$ 、 $2e10$ 、 $1e11$ 、 $2e11$ ，分別進行模擬。

E. 結果數據的計算

由於圖二、圖三的資料是 stagnation pressure 於垂直方向的分布，因此不能直接以 raw data 進行比較，並且由於氣流流入皮托管前有可能會經過一個 normal shock，所以 stagnation pressure 會有所耗損。我們處理模擬數據時，首先利用式(1) local mach number 與 local static pressure 計算進入皮托管前的 stagnation pressure：

$$P_{stag} = P_{static} * \left(1 + \left(\frac{\gamma - 1}{2}\right) M^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \dots \dots (1)$$

並利用式(2)計算 normal shock 前後的 stagnation pressure 比值：

$$\frac{P_{stag. \text{ after normal shock}}}{P_{stag. \text{ before normal shock}}} = \left[\frac{(\gamma + 1)M^2}{(\gamma - 1)M^2 - 2}\right]^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \left[\frac{\gamma + 1}{2\gamma M^2 - (\gamma - 1)}\right]^{\frac{1}{\gamma - 1}} \dots \dots (2)$$

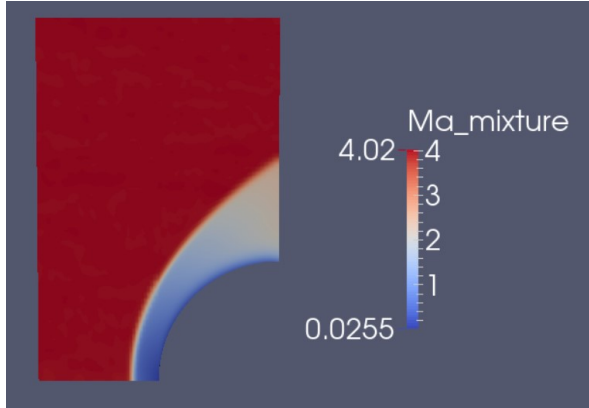
由於實驗數據的數據點與模擬結果的數據點分布於不同的垂直位置，我們利用內插法來求取在模擬結果的數據點分布位置應該要有的實驗結果數值。最後，我們求取實驗結果與模擬結果數據的誤差平方，作為評估模擬是否準確的手段。

III. 模擬結果

A. dsmcFoam+ 計算結果

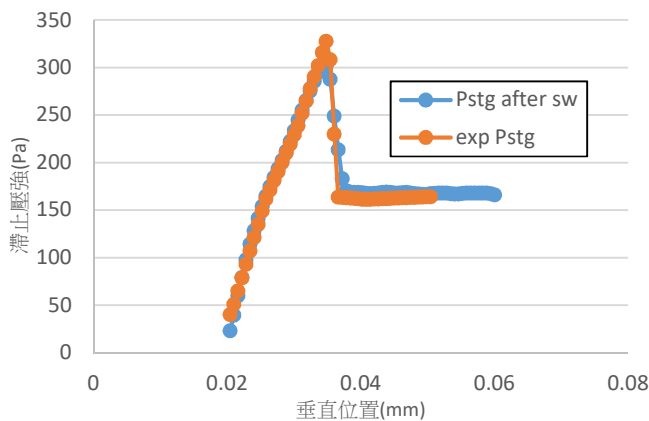
以下表列計算結果，顯示穩態時之流場狀況，其中到達穩態與否為人工認定，另外還有模擬和實驗數據之比較：

(1) 每顆 dsmc 粒子所代表的實際粒子數為 $2e8$



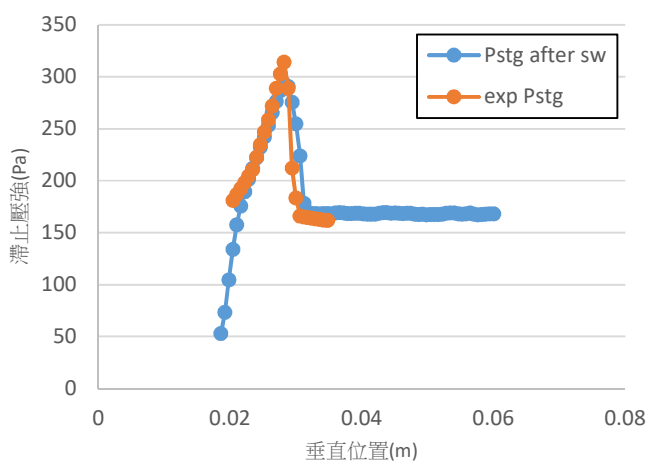
圖七：馬赫數分布之 contour

於球體中心處滯止壓強隨垂直位置之變化



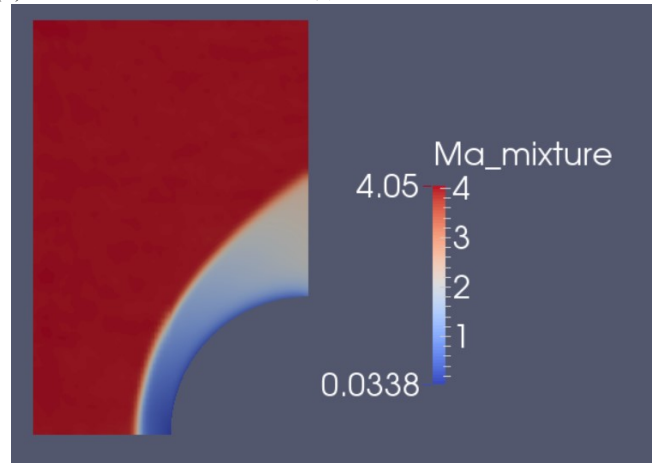
圖八：於球體中心處滯止壓強隨垂直位置之變化
(橘色為實驗數據，藍色為模擬數據)

距球體中心8mm處滯止壓強隨垂直位置之變化



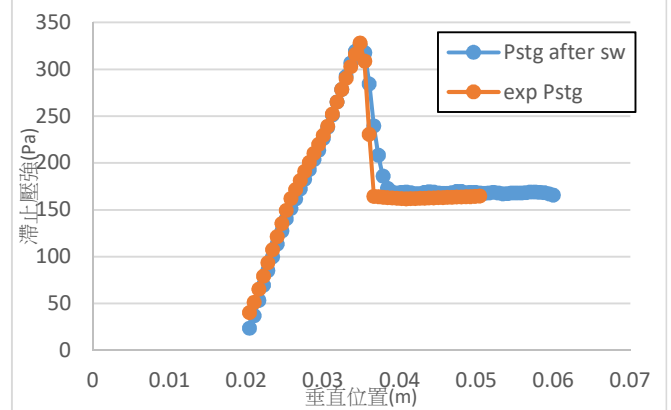
圖九：距球體中心 8mm 處滯止壓強隨垂直位置之變化
(橘色為實驗數據，藍色為模擬數據)

(2) 每顆 dsmc 粒子所代表的實際粒子數為 $2e9$



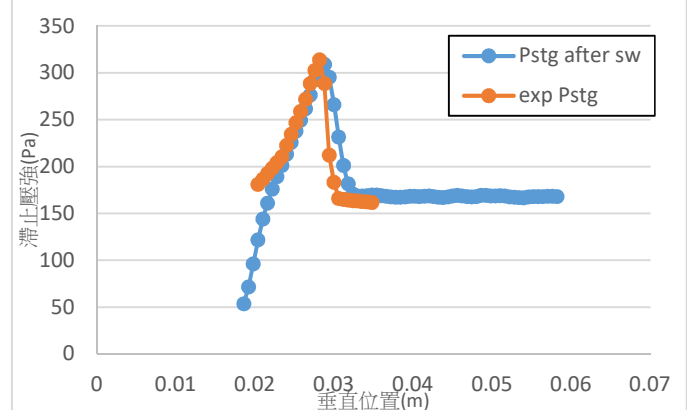
圖十：馬赫數分布之 contour

於球體中心處滯止壓強隨垂直位置之變化



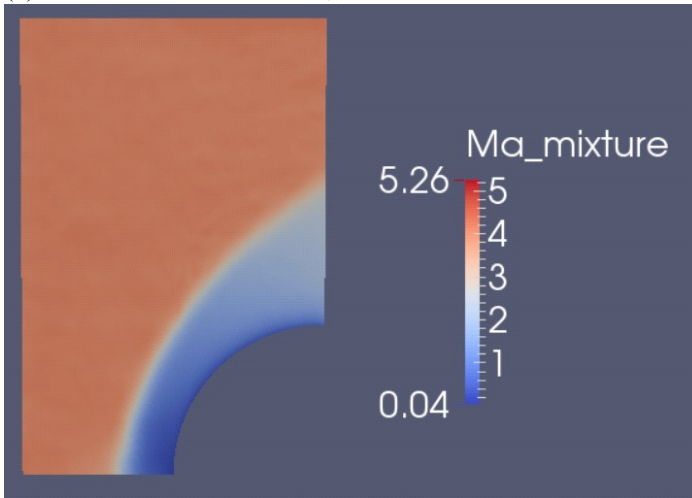
圖十一：於球體中心處滯止壓強隨垂直位置之變化
(橘色為實驗數據，藍色為模擬數據)

距球體中心8mm處滯止壓強隨垂直位置之變化



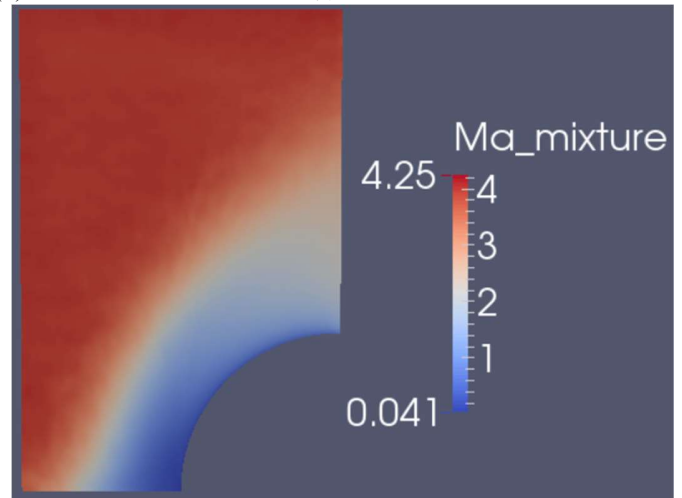
圖十二：距球體中心 8mm 處滯止壓強隨垂直位置之變化
(橘色為實驗數據，藍色為模擬數據)

(3) 每顆 dsmc 粒子所代表的實際粒子數為 2×10^{10}

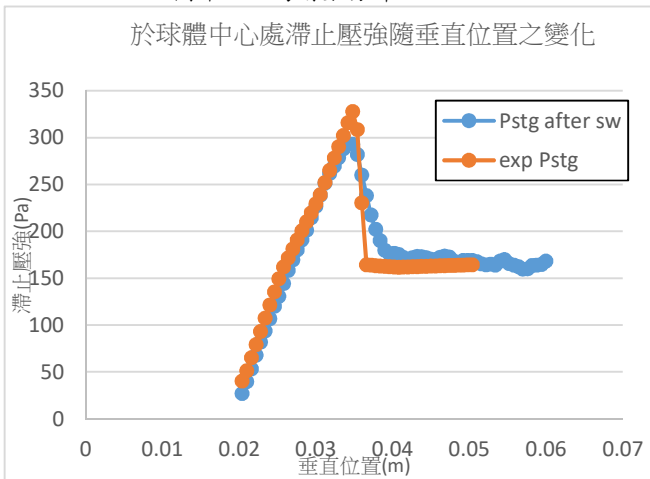


圖十三：馬赫數分布之 contour

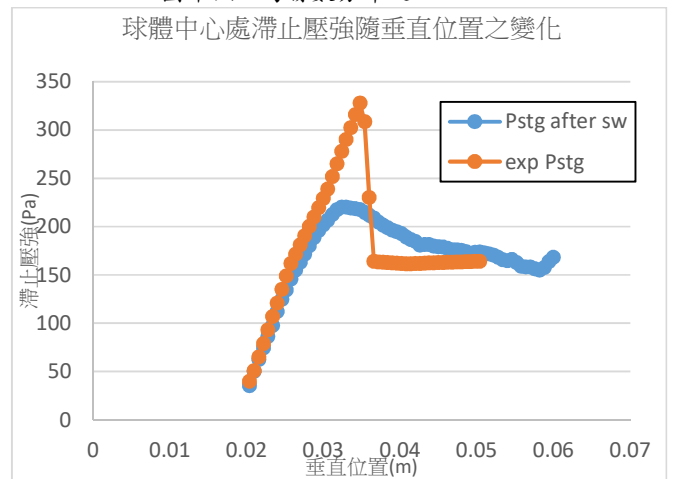
(4) 每顆 dsmc 粒子所代表的實際粒子數為 1×10^{11}



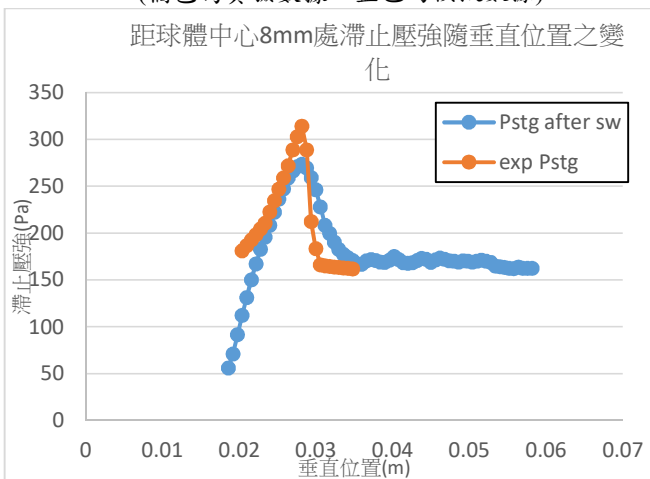
圖十六：馬赫數分布之 contour



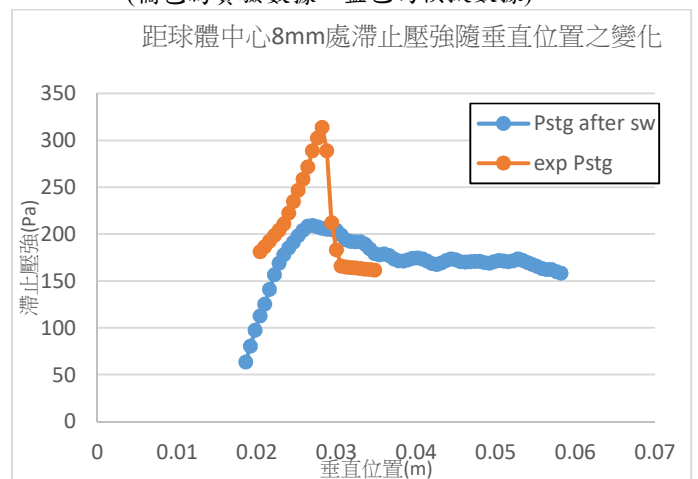
圖十四：於球體中心處滯止壓強隨垂直位置之變化
(橘色為實驗數據，藍色為模擬數據)



圖十七：於球體中心處滯止壓強隨垂直位置之變化
(橘色為實驗數據，藍色為模擬數據)

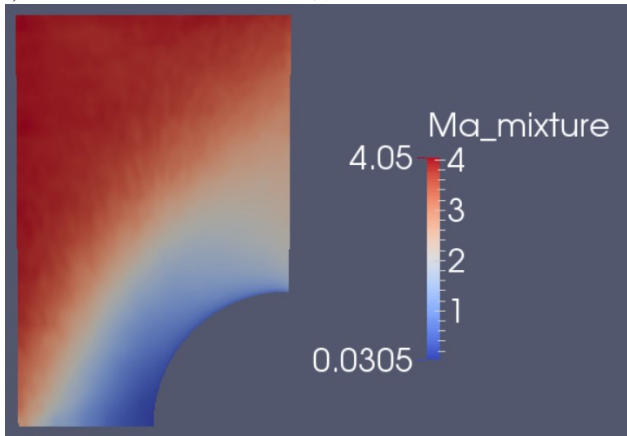


圖十五：距球體中心 8mm 處滯止壓強隨垂直位置之變化
(橘色為實驗數據，藍色為模擬數據)



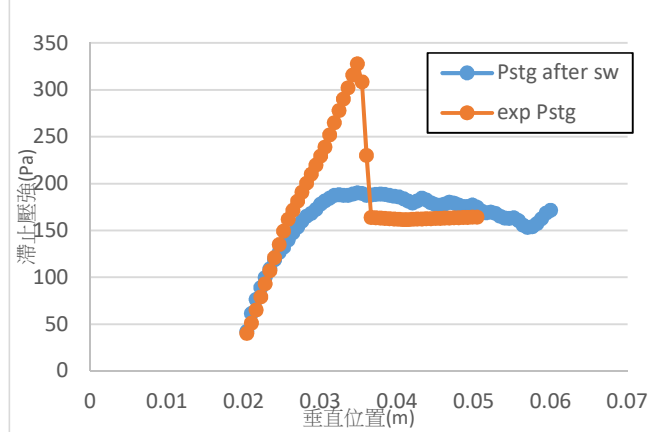
圖十八：距球體中心 8mm 處滯止壓強隨垂直位置之變化
(橘色為實驗數據，藍色為模擬數據)

(5) 每顆 dsmc 粒子所代表的實際粒子數為 $2e11$



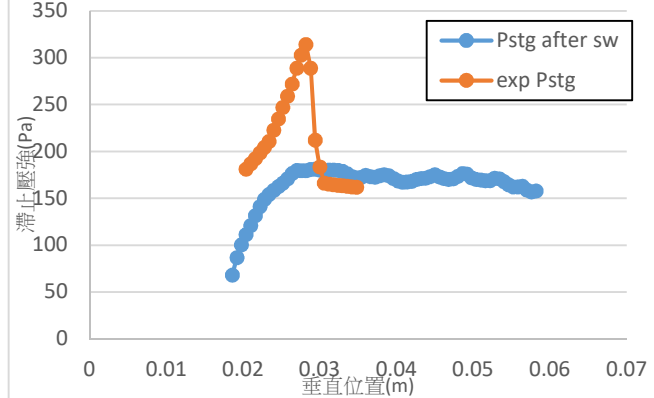
圖十九：馬赫數分布之 contour

於球體中心處滯止壓強隨垂直位置之變化



圖二十：於球體中心處滯止壓強隨垂直位置之變化
(橘色為實驗數據，藍色為模擬數據)

距球體中心 8mm 處滯止壓強隨垂直位置之變化



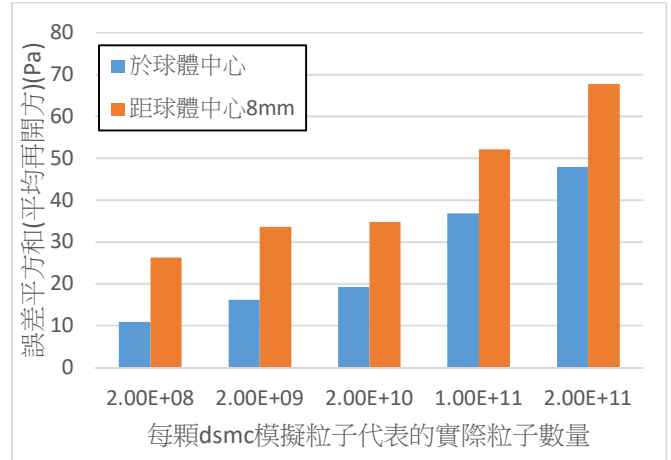
圖二十一：距球體中心 8mm 處滯止壓強隨垂直位置之變化

(橘色為實驗數據，藍色為模擬數據)

可以發現每顆 dsmc 粒子所代表的實際粒子數達到 $1e11$ 、 $2e11$ 時，模擬數據與實驗相差甚遠，並且在馬赫數分布之 contour 裡看不出有震波形成，可見模擬失敗，數據不可用。

B. 實驗與模擬之誤差平方與每顆 dsmc 粒子所代表的實際粒子數之關係

我們計算實驗與模擬之誤差平方和，並且平均、開根號，與每顆 dsmc 粒子所代表的實際粒子數進行比較：



圖二十二：每顆 dsmc 模擬粒子代表的實際粒子數量與誤差之關係

可以發現隨著模擬粒子的減少，誤差也隨之增加，值得一提的是，距離球心 8mm 的數據的誤差都比較高。

IV. 結論

A. 模擬結果顯示在每顆 dsmc 模擬粒子代表的實際粒子數量為 $2e8$ 、 $2e9$ 與 $2e10$ 時，與實驗數據相當吻合，這證明在這樣的求解器設置下，是可以計算出相當可信的結果的。另外，可以看到在每顆 dsmc 模擬粒子代表的實際粒子數量為 $1e11$ 、 $2e11$ 時，模擬明顯失敗。

B. 模擬結果之準確度與模擬粒子數量有正向關係，這可以由圖二十一看出來，這個結果可以為未來模擬類似狀況之流場時，作為設定求解器以及取捨模擬精確度之參考。

問題討論

1. Boundary Condition 在 outlet 處設定為 dsmcFreeStream-InflowPatch 並將溫度與速度設為常數明顯有違實際物理條件之嫌，雖然模擬結果與實際實驗接近，但為何這樣的 outlet 邊界條件對實際結果準確性影響不大有待討論。

2. 由於模擬僅限於流場前半部，流場後半部對前半部的影響不能由模擬得出，但在實際上是存在的，例如一個圓頭圓柱和球體在流場中必然擁有不同的流場特性，但如果使用這次的模擬方法，會使模擬的情境一模一樣。因此這可能造成模擬結果失去可信度。

3. 由於目標是達到流場穩態變化，因此模擬結果是由人工判斷是否到達穩態。要使模擬結果更加具有可重複性和可信度，應該要引入 DSMC 模擬的收斂指標，來給出量化的穩態判斷標準。

4. 關於模擬粒子數量與模擬結果之比較，更有意義的分析可能是觀察計算出的流場是否具有往特定結果收斂的趨勢，因此要採用流場什麼樣的特徵來進行收斂性分析將是相當值得探討的方向。

參考資料

- [1] Nicolas Rembaut, Romain Joussot and Viviana Lago (2020). "Analysis of the accuracy of OpenFOAM solvers for the problem of supersonic flow around a cone", Journal of Space Safety Engineering [On-line]. Available: https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S246889672030094X?casa_token=y0xkWZoKj8AAAAAA:IGfSUigQVPxmrcDnKQ4FFk8qtGmPukeg3f2UbtADWIKjWmnRouSLzsJZxCC539XNdJvb7deug#bib0026 [Jan, 22, 2021].
- [2] C.White, M.K.Borg, T.J.Scanlon, S.M.Longshaw, B.John, D.R.Emerson, J.M.Reese (2017). "dsmcFoam+: An OpenFOAM based direct simulation Monte Carlo solver" Computer Physics Communications. [On-line]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465517303375> [Jan, 22, 2021].