

行政院原子能委員會  
委託研究計畫研究報告

井式蒸氣火炬運轉機制之 3D 模擬研究  
**Three-Dimensional Modeling of Operation Mechanism  
for Well-Type Cathode Steam Torch**

計畫編號：1002001INER032

受委託機關(構)：國立臺灣科技大學

計畫主持人：趙修武

聯絡電話：02-27376793

E-mail address：chausw@ntust.edu.tw

核研所聯絡人員：許哲綸

報告日期：100 年 11 月 30 日

## 目 錄

目 錄.....	I
中文摘要.....	1
英文摘要.....	2
壹、計畫緣起與目的.....	3
貳、研究方法與過程.....	5
一、直流電漿火炬流場模型.....	7
二、電漿反應機制模型.....	10
三、電漿氣體傳輸係數模型.....	12
(一) 波茲曼運動方程式與粒子分佈函數.....	12
(二) 氣體傳輸係數.....	16
1. 電傳導係數.....	16
2. 黏性係數.....	18
3. 熱傳導係數.....	19
(三) 碰撞積分與有效碰撞截面.....	23
四、流場計算之數值離散方法.....	29
五、基於計算區間分割之平行化.....	31
(一) 分散式記憶體系統.....	31
(二) 共享式記憶體系統.....	33
參、主要發現與結論.....	35
一、電漿氣體傳輸係數.....	35
二、直流電漿火炬流場.....	50
三、GPU 計算平台效能分析.....	56
肆、參考文獻.....	60

## 中文摘要

本計畫在假設火炬內部電漿氣體具光學扁薄性、電漿氣體為電中性，以及穩態條件下，建立一套平行化數值計算程式，以有限體積法聯立求解連續方程式、動量方程式、能量方程式、紊流方程式以及電流連續方程式，使用安培定律計算流場電流分佈，利用歐姆定律計算磁場大小，分析以水蒸氣為工作氣體之井式非傳輸型直流電漿火炬內部高溫電漿氣體流場基本特性。本研究同時利用電漿模型的反應機制來計算水蒸氣電漿在流場內解離後的各物種濃度分布，此時電漿氣體之密度、黏度、比熱、熱傳導係數、導電率與熱輻射係數皆由解離後各物種濃度分布加以決定。處於熱平衡態之電漿氣體的傳輸係數，則利用闕普曼-安時考克法求解波茲曼方程式獲得。在滿足電流守恆條件下，本研究假設在陰極處電流密度假設為指數型態分佈。本研究擬使用虛擬網格技巧，利用計算區間分割進行計算工作平行化，以簡化不同區塊間資料傳遞與儲存的問題。本研究使用上述方法，進行穩態井式非傳輸型直流電漿火炬水蒸氣電漿熱流場的數值模擬。同時以平行化套件 HMPP 將電漿火炬流場計算程式轉化成 GPU 計算平台之原始碼，並評估不同平行計算平台的計算效能。

**關鍵詞：**傳輸係數、Chapman-Enskog 法、GPU 計算、蒸氣電漿流場。

## **Abstract**

Based on the assumption of plasma being optically thin and electrically neutral and steady flow, this project develops a parallelized program to simulate the flow field inside a plasma torch with taking the induced electrical and magnetic effects into account, where magneto-hydrodynamic equations, including the continuity equation, the momentum equations, the energy equation, the current continuity equation and the turbulence transport equations are solved by a finite volume discretization in a segregated manner. The density, viscosity, specific heat, heat conductivity, electrical conductivity and radiation emission coefficient of plasma flow determined by the concentration of different species of the plasma gas, where the kinetics model is employed to calculate the species concentration of the flow field. The transport coefficients of plasma gas at thermal equilibrium are obtained from the Chapman-Enskog solution of the Boltzmann equation. Steady simulations of dc plasma torch are conducted to investigate the heat and mass transfer characteristics of well-type non-transferred steam plasma flow. Additionally, the flow solver for GPU platform is implemented via the HMPP software, where the efficiency of parallel computation among different platforms is evaluated.

**Keywords:** transport coefficient, Chapman-Enskog method, GPU calculation, steam plasma flow.

## 壹、計畫緣起與目的

我國每年工業廢棄物產生量大約 1,800 萬公噸，約為生活垃圾量的二倍；其中有害工業廢棄物約為 150 萬公噸/年，所佔比率約為 8%。由於廢棄物的產生源不同，且各類廢棄物性質差異極大，均需有特殊的管理與處理技術。由於法令以及部份業者守法觀念不夠健全，由產生到處理、處置的過程中，常有不盡妥善的管理與處置，或甚而有不法傾倒及掩埋。這些結果都可能直接或間接地污染我國的環境生態及危害到人民的健康。電漿岩化技術可處理氣態、液態及固態廢棄物，有機物經熱解焚化減容，無機物經電漿熔融處理後，使有害重金屬均勻分佈於熔岩內達到 TCLP 要求，可符合最終處置或資源回收規範的要求。電漿岩化處理系統主要由進料系統、電漿熔融爐、電漿火炬系統、熔漿卸料系統、第二燃燒室、廢氣處理系統、廢氣監測系統等次系統所組成[1]。由於直流電漿火炬是熱電漿技術中重要的一環，該技術可應用於許多重要的工業用途，例如電漿噴塗、電漿焊接、電漿切割、電漿合成、熱電漿廢棄物處理、電漿輔助化學蒸鍍、電漿粉末萃鍊等[2,3]。近年來再生能源的課題日趨重要，其中合成氣(Syngas)的研究獲得許多研究學者的青睞[4-9]，因為合成氣可自天然有機物或廢棄物的化學反應中取得，滿足能源形式轉換以及能源回收的兩大優點。水蒸氣電漿除了具備高能量轉換效率與高氣體溫度的特性外，亦能同時產生反應性的離子與自由基，可提供合成氣反應所需的反應能量與反應物來源，成為合成氣生成的重要關鍵組件。為了研究電磁場、電漿氣體與溫度場間複雜的交互作用關係，必須能夠解析水電漿火炬內部流場、溫度場與電弧位置。因為電漿火炬的尺寸不大與電漿火炬內部高溫的環境，使

得量測工作變的十分困難。然而近年來電腦硬體的快速發展與數值技術的逐漸成熟，數值模擬可以用更為經濟與有效的方式，得以進行水電漿火炬內部之質傳與熱傳特性研究。

## 貳、研究方法與過程

對於直流電漿火炬內由電弧所產生的電漿，其基本特性假設如電漿具光學扁薄性(optically thin)、電漿為電中性(electrically neutral)電漿流場為紊流場(turbulent)。在基於上述假設下，考慮二維旋向速度分量以及紊流效應的電漿流場，可以用磁流體動力(magneto-hydrodynamic, MHD)方程組與紊流模型加以描述。磁流體動力方程組由電流連續方程式、連續方程式、動量方程式、能量方程式、安培法則、歐姆定律與紊流方程式組成[10]。

氣相化學反應部份，為能準確描述水蒸氣解離之化學變化，本研究中建立包括  $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{OH}$ 、 $\text{H}$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{H}_2$ 、 $\text{O}_2$ 、 $\text{HO}_2$ 、 $\text{H}_2\text{O}_2$ 、 $\text{O}_3$ 、 $\text{H}^+$ 、 $\text{O}^+$ 及電子(e)等主要 12 個物種與 52 個化學反應式模型，其機制主要包括中性-中性、中性-電子的化學反應變化。本研究在模擬計算中所使用的物種反應方程式，必須考慮上述主要物種反應機制中的各個物種變化，即水蒸氣( $\text{H}_2\text{O}$ )、氫氧自由基( $\text{OH}$ )、氫原子( $\text{H}$ )、氧原子( $\text{O}$ )、氫氣( $\text{H}_2$ )、氧氣( $\text{O}_2$ )、過氧化氫( $\text{H}_2\text{O}_2$ )、過氧化氫自由基( $\text{HO}_2$ )、臭氧( $\text{O}_3$ )、氫離子( $\text{H}^+$ )、氧離子( $\text{O}^+$ )、電子(e)等物種濃度在空間中的分佈。本研究使用下列統御方程式(4)描述對一特定物種的化學反應以及傳遞機制，由於以穩態方式進行求解，因此忽略時間項的影響[11]。

在不同溫度與壓力條件下之電漿氣體的傳輸係數如氣體黏性、熱傳導係數與電傳導係數，可基於氣體輸運理論加以計算獲得。本研究中考慮的熱平衡態之電漿氣體的傳輸係數則利用闕普曼-安時

考克法求解波茲曼方程式獲得[12]。

使用有限體積法的離散方式，將流場統御方程組之偏微分方程式對任意控制單元積分，則可得到一通式。在相鄰控制體界面之廣義對流項，使用皮卡疊代法(Picard iteration method)加以近似。廣義擴散項以差分法加以近似。源項以均值定理加以近似。若將該通式中的各項以鄰近控制體中心的節點值加以近似，便可得到一聯立方程組。利用求解線性聯立方程組的數值方法，來求解上述之聯立方程組便可求得流場中之速度、壓力、電位差、紊流特性與溫度等物理量[13]。

本研究所採用的平行化技術為基於計算區間分割之平行化。在這類的平行分割中，為了簡化不同區塊間資料傳遞與儲存的問題，通常在區塊實際邊界上使用虛擬網格的技巧[14]。由於 GPU 計算平台為共享記憶體架構，為了進行在 GPU 計算平台的平行化計算，本研究使用基於共享記憶體架構硬體開發之 HMPP 編譯系統進行流場計算程式的平行化[15]。由於平行電腦叢計算平台為分散記憶體架構，為了進行在平行電腦叢計算平台的平行化計算，本研究使用基於分散記憶體架構硬體開發之 MPI 程式庫進行流場計算程式的平行化[16]。最後並比較不同平行計算平台之計算效率差異。



## 一、直流電漿火炬流場模型[10]

對於直流電漿火炬內由電弧所產生的熱電漿，其基本特性假設如下：

1. 電漿具光學扁薄性(optically thin)
2. 電漿為電中性(electrically neutral)
3. 電漿流場為紊流場(turbulent)

在基於上述假設下，考慮二維旋向速度分量以及紊流效應的電漿流場，可以用磁流體動力(magneto-hydrodynamic, MHD)方程組與紊流模型加以描述。磁流體動力方程組由電流連續方程式、連續方程式、動量方程式、能量方程式、安培法則、歐姆定律與紊流方程式組成：

電流連續方程式

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \sigma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \sigma r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) = 0 \quad (1.1)$$

連續方程式

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r v) = 0 \quad (1.2)$$

動量方程式(z 方向)

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial z} + \rho v \frac{\partial u}{\partial r} = -\frac{\partial P}{\partial z} + j_z B_\theta + \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rz}) + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right] \quad (1.3)$$

動量方程式(r 方向)

$$\rho u \frac{\partial v}{\partial z} + \rho v \frac{\partial v}{\partial r} = -\frac{\partial P}{\partial r} - j_z B_\theta + \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rr}) - \frac{\tau_{\theta\theta}}{r} + \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z} \right] + \frac{\rho v_\theta^2}{r} \quad (1.4)$$

動量方程式( $\theta$  方向)

$$\rho u \frac{\partial w}{\partial z} + \rho v \frac{\partial w}{\partial r} = \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{r\theta}) + \frac{\partial \tau_{z\theta}}{\partial z} \right] - \frac{\rho u w}{r} \quad (1.5)$$

其中

$$\begin{aligned} \tau_{rr} &= 2\mu \frac{\partial u}{\partial r}, \quad \tau_{\theta\theta} = 2\mu \left( \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{u}{r} \right), \quad \tau_{zz} = 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \\ \tau_{r\theta} = \tau_{\theta r} &= \mu \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} \right], \\ \tau_{z\theta} = \tau_{\theta z} &= \mu \left[ \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right], \\ \tau_{rz} = \tau_{zr} &= \mu \left[ \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right] \end{aligned} \quad (1.6)$$

能量方程式

$$\begin{aligned} \rho c_p u \frac{\partial T}{\partial z} + \rho c_p v \frac{\partial T}{\partial r} &= \frac{j_z^2 + j_r^2}{\sigma} - S_R + \frac{5k_B}{2} \left( j_z \frac{\partial T}{\partial z} + j_r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( rk \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + v \frac{\partial P}{\partial r} + u \frac{\partial P}{\partial z} \end{aligned} \quad (1.7)$$

安培法則

$$j_z = -\sigma \frac{\partial \phi}{\partial z}, \quad j_r = -\sigma \frac{\partial \phi}{\partial r} \quad (1.8)$$

歐姆定律

$$B_\theta = \frac{\mu_0}{r} \int_0^r j_z \xi d\xi \quad (1.9)$$

K- $\varepsilon$ 紊流方程式

$$\begin{aligned} \rho u \frac{\partial K}{\partial z} + \rho v \frac{\partial K}{\partial r} &= G - \rho \varepsilon + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \mu_l + \frac{\mu_t}{C_k} \right) \frac{\partial K}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \left( \mu_l + \frac{\mu_t}{C_\varepsilon} \right) \frac{\partial K}{\partial r} \right] \\ \rho u \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} + \rho v \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} &= C_1 G \frac{\varepsilon}{K} - C_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{K} \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \mu_l + \frac{\mu_t}{C_k} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \left( \mu_l + \frac{\mu_t}{C_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right] \end{aligned} \quad (1.10)$$

$$G = \mu_t \left[ 2 \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial v}{\partial r} \right)^2 + 2 \left( \frac{v}{r} \right)^2 + \left( \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left( r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{w}{r} \right) \right)^2 + \left( \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right]$$

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{K^2}{\varepsilon}, \quad k_t = \frac{\mu_t c_p}{\text{Pr}_t} \quad (1.11)$$

其中  $\rho$  表示流體密度， $\sigma$  表示導電率， $u$ 、 $v$ 、 $w$  表示速度向量在  $z$ 、 $r$ 、 $\theta$  方向上分量， $B_\theta$  表示表示在  $\theta$  方向上分量電流誘導磁場， $\phi$  表示電動勢， $j_r$  與  $j_z$  分別表示電流向量在  $r$  與  $z$  方向分量， $P$  表示壓力， $\tau$  表示剪力張量， $S_R$  表示輻射損失， $k$  表示熱傳導係數， $T$  表示溫度， $c_p$  表示比熱， $k_B$  波茲曼常數， $\mu_0$  表示導磁係數， $K$  表示紊流動能， $\varepsilon$  表示紊流動能之消散率， $\mu_l$  表示流體黏性， $\mu_t$  表示紊流黏性， $k_t$  表示紊流熱傳導係數， $C_\mu$ 、 $\text{Pr}_t$ 、 $C_k$ 、 $C_\varepsilon$ 、 $C_1$ 、 $C_2$  表示紊流模型係數， $G$  是黏滯性擴散項。

## 二、電漿反應機制模型[11]

在氣相化學反應部份，為能準確描述水蒸氣解離之化學變化，本研究中建立包括  $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{OH}$ 、 $\text{H}$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{H}_2$ 、 $\text{O}_2$ 、 $\text{HO}_2$ 、 $\text{H}_2\text{O}_2$ 、 $\text{O}_3$ 、 $\text{H}^+$ 、 $\text{O}^+$ 及電子(e)等主要 12 個物種與 52 個化學反應式模型，各物種氣相反應機制與反應速率整理如下表一所示，其機制主要包括中性-中性、中性-電子的化學反應變化。

本研究在模擬計算中所使用的物種反應方程式，必須考慮上述主要物種反應機制中的各個物種變化，即水蒸氣( $\text{H}_2\text{O}$ )、氫氧自由基( $\text{OH}$ )、氫原子( $\text{H}$ )、氧原子( $\text{O}$ )、氫氣( $\text{H}_2$ )、氧氣( $\text{O}_2$ )、過氧化氫( $\text{H}_2\text{O}_2$ )、過氧化氫自由基( $\text{HO}_2$ )、臭氧( $\text{O}_3$ )、氫離子( $\text{H}^+$ )、氧離子( $\text{O}^+$ )、電子(e)等物種濃度在空間中的分佈。本研究使用下列統御方程式(4)描述對一特定物種的化學反應以及傳遞機制，由於以穩態方式進行求解，因此忽略時間項的影響：

$$\nabla \cdot (\rho y_i \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla y_i) + S_i \quad (2.1)$$

其中  $\mathbf{u}$  表示速度向量(m/s)， $y_i$  分別表示上述各物種濃度， $D_i$  為各物種的等效擴散係數( $\text{m}^2/\text{s}$ )， $S_i$  代表一源項。研究中，所使用的反應式為二階與三階反應式，因此各物種在求解過程中其源項  $S_i$  可以下式進行定義計算，如下式所示。

$$S_i = M_i \sum R_j = a_p y_i + s_p \quad (2.2)$$

各物種源項經離散後之係數  $a_p$  與源項  $s_p$  如表二所示。其中  $M_i$  為此物種之分子量( $\text{kg}/\text{kmole}$ )， $R_j$  為生成莫耳數( $\text{kmole}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$ )。

當化學反應式為二階時， $R_j$  項由下列方程式決定：

$$R_j = k_j \times \frac{y_a \rho}{M_a} \times \frac{y_b \rho}{M_b} \quad (2.3)$$

當化學反應式為三階時， $R_j$  項由下列方程式決定：

$$R_j = k_j \times \frac{y_a \rho}{M_a} \times \frac{y_b \rho}{M_b} \times \frac{y_c \rho}{M_c} \quad (2.4)$$

其中  $k_j$  為各化學反應式之生成常數 ( $\text{m}^{3(n-1)}/\text{kmole}^{(n-1)} \cdot \text{s}$ ，其中  $n$  為階數)， $y_a$ 、 $y_b$ 、 $y_c$  分別為反應式中互相碰撞物種之質量分率， $M_a$ 、 $M_b$ 、 $M_c$  分別為各碰撞物種之分子量 ( $\text{kg}/\text{kmole}$ )， $\rho$  為系統密度 ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )，並以理想氣體方程式決定。

### 三、電漿氣體傳輸係數模型

#### (一)波茲曼運動方程式與粒子分佈函數

本研究根據[12]的方法使用動力論(Kinetic Theory)進行電漿氣體傳輸係數(Transport Coefficient)的估算。由於電漿氣體處於部分離子化的狀態，因此在進行粒子間動量與能量移轉的分析時，除了考慮剛球作用模型(Rigid Sphere Interaction Model)的短距離力之交互作用外，也必須同時考慮長距離庫倫電磁力的影響。由於波茲曼(Boltzmann)方程式為稀薄氣體動力學的基本方程式，所以首先必須求解波茲曼方程式，以獲得氣體組成成份不同粒子的分佈函數(Distribution Function)。本研究使用恩斯考克-闕普曼(Enskog-Chapman)方法求解波茲曼方程式，該方法中假設氣體組成粒子的分佈函數可表示為無限項次的級數，但其中前兩項最為重要而具代表性。該無限項次級數的第一項代表氣體混合物處於平衡態的貢獻項，也就是說氣體中所有粒子的溫度皆相等，同時氣體混合物的平均速度與各分量的平均速度也相同，此時各分量氣體各自處於平衡狀態，各分量彼此間也處於平衡狀態。若氣體偏離此平衡態，歸其原因主要是因為內部或外部作用力使得分子間藉由二元碰撞進行動量與能量轉移產生變化，因此該無限項次級數的第二項代表氣體混合物偏離平衡態的貢獻項，一般假設該項與溫度梯度、速度梯度或密度梯度成正比關係。在布涅特(Burnett)近似法中，則進一步考慮該無限項次級數的第三項的影響，同時假設該項與流體動力變數梯度的二次方型式成正比關係。在本研究中，假設混合氣體平衡態僅由粒子間的動量與能量移轉決定而外力與粒子在空間與時間分佈的不均勻性可視為為微小擾動[17]。此時在達成粒子間動量與能

量平衡所需的鬆弛時間(Relaxation Time)遠小於因外力、粒子分佈不均勻性、溫度或氣體平均速度造成粒子間動量與能量平衡所需的鬆弛時間。

若假設粒子在平衡態的分佈函數 $f_i^{(0)}$ 可由下列積分方程式決定

$$\sum_{j=1}^{\nu} J(f_i^{(0)}, f_j^{(0)}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, \nu \quad (3.1)$$

其中 $J(f_i^{(0)}, f_j^{(0)}) = \iiint [f_i^{(0)} f_j^{(0)} - f_i^{(0)} f_j^{(0)}] g_{ij} b db d\epsilon d\mathbf{v}_j$  表波茲曼碰撞積分， $g_{ij}$  表粒子碰撞前的相對速度， $b$  表粒子在碰撞過程的最小距離， $\epsilon$  表粒子碰撞角度， $\mathbf{v}_j$  表粒子速度， $\nu$  表氣體混合物中粒子種類數目。若粒子分佈函數為平衡態的麥克斯威爾(Maxwell)分佈，則粒子分佈函數自動滿足波茲曼方程式：

$$f_i^{(0)} = n_i \left( \frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp\left( -\frac{m_i V_i^2}{2kT} \right) \quad (3.2)$$

其中 $n_i$  為粒子密度， $m_i$  為粒子質量， $k$  為波茲曼常數(Boltzmann Constant)， $V_i$  為粒子相對速度(Peculiar Velocity)， $T$  為粒子溫度。此時所有粒子的平均速度與溫度皆相等。若使用混合氣體各分量粒子的動量、能量與密度方程式，方程式(3.1)則可化簡為氣體混合物之涅維爾-史托克(Navier-Stokes)近似表示，如下式所示

$$\begin{aligned} & f_i^{(0)} \left\{ \frac{n}{n_i} \mathbf{V}_i \mathbf{d}_i + \mathbf{b}_i : \frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial \mathbf{r}} - \left( \frac{5}{2} - W_i^2 \right) \frac{\partial \ln T}{\partial \mathbf{r}} \right. \\ & \left. = \sum_{j=1}^{\nu} \iiint (\varphi'_i + \varphi'_j - \varphi_i - \varphi_j) f_i^{(0)} f_j^{(0)} g_{ij} b db d\epsilon d\mathbf{v}_j \right. \quad (3.3) \\ & \quad \quad \quad i = 1, 2, \dots, \nu \end{aligned}$$

其中 $n$  為總粒子密度， $\mathbf{r}$  為位置向量， $\mathbf{v}_0$  為平均速度， $\mathbf{V}_i$  為粒子相對速度，方程式(3.3)中的 $\mathbf{d}_i$ 、 $\mathbf{b}_i$  與 $\mathbf{W}_i$ 如下所示：

$$\mathbf{d}_j = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \frac{n_j}{n} \right) + \left( \frac{n_j}{n} - \frac{n_j m_j}{\rho} \right) \frac{\partial \ln p}{\partial \mathbf{r}} - \frac{n_j m_j}{p \rho} \left( \frac{\rho \mathbf{F}_j}{m_j} - \sum_{j=1}^{\nu} n_j \mathbf{F}_j \right) \quad (3.4)$$

$$\mathbf{b}_i = 2(\mathbf{W}_i \mathbf{W}_i - \frac{1}{3} W_i^2 \mathbf{U}) \quad (3.5)$$

$$\mathbf{W}_i = \left(\frac{m_i}{2kT}\right)^{1/2} \mathbf{V}_i \quad (3.6)$$

其中  $p$  為氣體壓力， $\rho$  為氣體密度， $\mathbf{F}_j$  為外力， $\mathbf{U}$  為單位張量。而方程式(3.3)中的函數  $\varphi_i$  可表示為

$$\varphi_i = -\mathbf{A}_i \frac{\partial \ln T}{\partial \mathbf{r}} - \mathbf{B}_i : \frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial \mathbf{r}} + n \sum_{j=1}^v \mathbf{c}_{ij} \cdot \mathbf{d}_j \quad (3.7)$$

由於假設氣體處於平衡態，而外力的影響可視為平衡態的微小偏移，所以

$$\sum_{j=1}^v \mathbf{d}_j = 0 \quad (3.8)$$

將方程式(3.3)經由進一步的簡化，可獲得下列方程式

$$f_i^{(0)} \left(\frac{5}{2} - W_i^2\right) \mathbf{V}_i = \sum_{j=1}^v \iiint (\mathbf{A}'_i + \mathbf{A}'_j - \mathbf{A}_i - \mathbf{A}_j) f_i^{(0)} f_j^{(0)} g_{ij} b db d\boldsymbol{\varepsilon} d\mathbf{v}_j \quad (3.9)$$

$$f_i^{(0)} \mathbf{b}_i = \sum_{j=1}^v \iiint (\mathbf{B}'_i + \mathbf{B}'_j - \mathbf{B}_i - \mathbf{B}_j) f_i^{(0)} f_j^{(0)} g_{ij} b db d\boldsymbol{\varepsilon} d\mathbf{v}_j \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} f_i^{(0)} (\delta_{ih} - \delta_{ik}) \mathbf{V}_i = \\ \sum_{j=1}^v \iiint (\mathbf{C}'_{ih} + \mathbf{C}'_{jh} - \mathbf{C}'_{ik} - \mathbf{C}'_{jk} - \mathbf{C}_{ih} - \mathbf{C}_{jh} + \mathbf{C}_{ik} + \mathbf{C}_{jk}) f_i^{(0)} f_j^{(0)} g_{ij} b db d\boldsymbol{\varepsilon} d\mathbf{v}_j \end{aligned} \quad (3.11)$$

若藉由定義  $\mathbf{C}_{ihk} = \mathbf{C}_{ik} - \mathbf{C}_{ik}$ ，則方程式(11)可進一步化簡為

$$\frac{1}{n} f_i^{(0)} (\delta_{ih} - \delta_{ik}) \mathbf{V}_i = \sum_{j=1}^v \iiint (\mathbf{C}'_{ihk} + \mathbf{C}'_{jkh} - \mathbf{C}_{ihk} - \mathbf{C}_{jkh}) f_i^{(0)} f_j^{(0)} g_{ij} b db d\boldsymbol{\varepsilon} d\mathbf{V}_j \quad (3.12)$$

而函數  $\mathbf{A}_i$ 、 $\mathbf{B}_i$ 、 $\mathbf{C}_{ijn}$  可藉由索寧(Sonin)多項式  $S_n^{(m)}$  表示為

$$\mathbf{A}_i = \mathbf{W}_i A_i(W_i, n_i, t) = \mathbf{W}_i \sum_{m=0} a_i^{(m)} S_{3/2}^{(m)}(W_i^2) \quad (3.13)$$

$$\mathbf{C}_{ijh} = W_i C_{ijh}(W_i, n_i, n_j, t) = \mathbf{W}_i \sum_{m=0} C_{ijh}^{(m)} S_{3/2}^{(m)}(W_i^2) \quad (3.14)$$



$$\mathbf{B}_i = \frac{1}{2} \mathbf{b} B_i(W_i, n_i, t) = \frac{1}{2} \mathbf{b}_i \sum_{m=0}^{\xi-1} b_i^{(m)} S_{5/2}^{(m)}(W_i^2) \quad (3.15)$$

本研究使用[17]建議的方法，利用變分法計算混合氣體中具多種氣體分量的情形。由於試驗函數(Trial Function)為滿足麥克斯威爾分子模型之線性化碰撞運算元的解，因此本研究使用有限項次來近似方程式(3.13)、(3.14)與(3.15)所代表的值。若進一步考慮下列因氣體平衡態演伸變分問題的附屬條件

$$\sum_{i=1}^v \sqrt{m_i} \int f_i^{(0)}(\mathbf{C}_{ih} - \mathbf{C}_{ik}) W_i d\mathbf{v}_i = 0 \quad (3.16)$$

$$\sum_{i=1}^v \sqrt{m_i} \int f_i^{(0)}(\mathbf{A}_i \cdot \mathbf{W}_i) d\mathbf{v}_i = 0 \quad (3.17)$$

方程式(3.9)、(3.10)與(3.12)可進一步化簡為下列方程式

$$n_i \left( \frac{2kT}{m_i} \right)^{1/2} \delta_{0m} = \sum_{j=1}^v \sum_{m'=0}^{\xi-1} [Q_{ij}^{(m,m')} - \frac{n_j}{n_i} \sqrt{\frac{m_j}{m_i}} Q_{ii}^{(m,m')} \delta_{0m} \delta_{0m'}] a_j^{(m')} \quad (3.18)$$

$$(\delta_{ih} - \delta_{ik}) \delta_{0m} \frac{3}{2} \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} = \sum_{j=1}^v \sum_{m'=0}^{\xi-1} [\tilde{Q}_{ij}^{(m,m')} - \frac{n_j}{n_i} \sqrt{\frac{m_j}{m_i}} \tilde{Q}_{ii}^{(m,m')} \delta_{0m} \delta_{0m'}] C_{jkh}^{(m')} \quad (3.19)$$

$$5n_i \delta_{m0} = \sum_{j=1}^v \sum_{m'=0}^{\xi-1} Q_{ij}^{(m,m')} b_j^{(m')}, \quad i=1, \dots, v \quad \text{and} \quad m=0, 1, \dots, \xi-1 \quad (3.20)$$

因此原始以積分與微分型態表示的波茲曼方程式可以化約為線性的聯立方程組，而該方程組中的係數 $\tilde{Q}_{ij}^{(m,m')}$ 與 $Q_{ij}^{(m,m')}$ 則如下所示

$$\tilde{Q}_{ij}^{(m,m')} = \sum_{l=1}^v n_l n_i \{ \delta_{ij} [\mathbf{W}_i S_{3/2}^{(m)}(W_i^2), \mathbf{W}_i S_{3/2}^{(m')}(W_i^2)]_{il} + \delta_{jl} [\mathbf{W}_i S_{3/2}^{(m)}(W_i^2), \mathbf{W}_l S_{3/2}^{(m')}(W_l^2)]_{il} \} \quad (3.21)$$

$$Q_{ij}^{(m,m')} = \sum_{l=1}^v n_l n_i \{ \delta_{ij} [\frac{1}{2} \mathbf{b}_i S_{5/2}^{(m)}(W_i^2), \frac{1}{2} \mathbf{b}_i S_{5/2}^{(m')}(W_i^2)]_{il} + \delta_{jl} [\frac{1}{2} \mathbf{b}_i S_{5/2}^{(m)}(W_i^2), \frac{1}{2} \mathbf{b}_l S_{5/2}^{(m')}(W_l^2)]_{il} \} \quad (3.22)$$

## (二) 氣體傳輸係數

### 1. 電傳導係數

若氣體中第  $i$  種粒子的平均擴散速度(Diffusion Velocity) $\langle \mathbf{V}_i \rangle$  可以使用下列方程式表示

$$\langle \mathbf{V}_i \rangle = \frac{1}{n_i} \int \mathbf{V}_i f_i d\mathbf{V}_i \quad (3.23)$$

將方程式(3.7)中的函數  $\phi_i$  代入上式，粒子的平均擴散速度可表示為

$$\langle \mathbf{V}_i \rangle = \frac{1}{n_i} \int [n \sum_{j=1}^v \mathbf{C}_{ij} \mathbf{d}_j - \mathbf{A}_i \cdot \frac{\partial \ln T}{\partial \mathbf{r}}] \mathbf{V}_i f_i^{(0)} d\mathbf{V}_i \quad (3.24)$$

接著將方程式(3.13)與(3.14)中的  $\mathbf{A}_i$  與  $\mathbf{C}_{ij}$  代入上式，粒子的平均擴散速度可表示為

$$\langle \mathbf{V}_i \rangle = \frac{n^2}{n_i \rho} \sum_j m_j D_{ij} \mathbf{d}_j - \frac{1}{n_i m_i} D_i^T \frac{\partial \ln T}{\partial \mathbf{r}} \quad (3.25)$$

其中  $D_{ij}$  與  $D_i^T$  分別代表氣體混合物中分量氣體的擴散係數(Diffusion Coefficient)與熱擴散係數(Thermal Diffusion Coefficient)。這兩個係數基於正交條件(Condition of Orthogonality)可表示為

$$D_{ij}(\xi) = \frac{\rho n_i}{2n m_j} \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} c_{ij}^{(0)}(\xi) \quad (3.26)$$

$$D_i^T(\xi) = \frac{n_i m_i}{2n m_j} \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} a_i^{(0)}(\xi) \quad (3.27)$$

若假設若氣體中第  $i$  種粒子帶有  $eZ_i$  的電荷，總電流可藉由擴散速度加以定義

$$\mathbf{j} = e \sum_k n_k Z_k \langle \mathbf{V}_k \rangle = \sum_k \mathbf{j}_k \quad (3.28)$$

因為帶有電荷的粒子皆會參與電荷的移轉過程，因此利用方程式(3.25)的相似性，總電流可以表示為

$$\mathbf{j} = e \sum_k Z_k \left[ \frac{n^2}{\rho} \sum_j m_j D_{kj} \mathbf{d}_j - \frac{1}{m_k} D_k^T \frac{\partial \ln T}{\partial \mathbf{r}} \right] \quad (3.29)$$

故上式可視為基於所考慮粒子系統的歐姆定律(Ohm's Law)，而其中的向量  $\mathbf{d}_j$  必須藉由因電場強度所產生的電磁力加以決定，

$$\mathbf{F}_i = e \mathbf{E} Z_i \quad (3.30)$$

若不考慮其他外力作用時，向量  $\mathbf{d}_j$  可表示為

$$\mathbf{d}_i = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \frac{n_i}{n} \right) - \left( \frac{n_i}{n} - \frac{n_i m_i}{\rho} \right) \frac{\partial \ln p}{\partial \mathbf{r}} + \frac{n_i m_i e \mathbf{E}}{p \rho} \left( \sum_j n_j Z_j - \rho \frac{Z_i}{m_i} \right) \quad (3.31)$$

使用方程式(3.29)、(3.30)與(3.31)，電傳導係數可定義為

$$\sigma = \frac{e^2 n^2}{p \rho^2} \sum_i Z_i \sum_j n_j m_j^2 D_{ij} \left( \sum_k n_k Z_k - \rho \frac{Z_j}{m_j} \right) \quad (3.32)$$

## 2. 黏性係數

因動量變化所造成混合氣體中第  $i$  種粒子產生的分壓可以使用下列方程式表示

$$\mathbf{p}_j = n_j m_j \langle \mathbf{V}_j \mathbf{V}_j \rangle = m_j \int \mathbf{V}_j \mathbf{V}_j f_j^{(0)} d\mathbf{V}_j \quad (3.33)$$

因為混合氣體的壓力  $\mathbf{p}$  為各分壓  $\mathbf{p}_j$  的總和，若將氣體壓力表示為  $\mathbf{B}_j$  的函數

$$\mathbf{p} = p\mathbf{U} - \sum_j m_j \int \mathbf{V}_j \mathbf{V}_j (\mathbf{B}_j : \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0) f_j^{(0)} d\mathbf{V}_j \quad (3.34)$$

其中速度位移張量(Velocity Displacement Tensor) $\mathbf{S}$  的分量  $S_{\alpha\beta}$  可表示為

$$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial V_{0\beta}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial V_{0\alpha}}{\partial x_\beta} \right] - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 \quad (3.35)$$

故混合氣體的壓力  $\mathbf{p}$  可表示為下式

$$\mathbf{p} = p\mathbf{U} - 2\eta\mathbf{S} \quad (3.36)$$

其中黏性係數  $\eta$  可表示為

$$\eta = \frac{1}{15} \sum_j \frac{m_j^2}{2kT} \int \mathbf{B}_j (W_j^2) V_j^4 f_j^{(0)} d\mathbf{V}_j \quad (3.37)$$

在使用多項式正交性的關係，黏性係數  $\eta$  可進一步表示為

$$\eta = \frac{1}{2} kT \sum_j n_j b_j^{(0)}(\xi) \quad (3.38)$$

### 3. 熱傳導係數

混合氣體中的熱通量可以使用下列方程式表示

$$\mathbf{q} = \frac{1}{2} \sum_j m_j \int V_j^2 \mathbf{V}_j f_j d\mathbf{V}_j \quad (3.39)$$

若將粒子分佈函數帶入上式，混合氣體中的熱通量則可以表示為

$$\mathbf{q} = \frac{1}{2} \sum_j m_j \int [n \sum_k (\mathbf{C}_{jk} \cdot \mathbf{d}_k) - (\mathbf{A}_j \cdot \frac{\partial \ln T}{\partial \mathbf{r}})] V_j^2 \mathbf{V}_j f_j^{(0)} d\mathbf{V}_j \quad (3.40)$$

經過進一步的化簡，混合氣體中的熱通量則可以進一步表示為

$$\mathbf{q} = \frac{5}{2} kT \sum_j n_j \langle \mathbf{V}_j \rangle - \lambda' \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} - nkT \sum_j n_j m_j D_j^T \mathbf{d}_j \quad (3.41)$$

其中  $\lambda'$  為位移熱傳導係數(Translation Thermal Conductivity)，該值可表示為

$$\lambda' = -\frac{5}{4} k \sum_j n_j \sqrt{\frac{2kT}{m_j}} a_j^{(1)}(\xi) \quad (3.42)$$

若將方程式(3.24)表示為矩陣型式

$$\|\wp_{ij}\| \cdot \|\mathbf{d}_j\| = \|\langle \mathbf{V}_i \rangle\| + \|\wp_i^T\| \cdot \left\| \frac{\partial \ln T}{\partial \mathbf{r}} \right\| \quad (3.43)$$

其中

$$\wp_{ij} = \frac{n^2 m_i}{n_i \rho} D_{ij}, \quad \wp_i^T = \frac{1}{n_i m_i} D_i^T \quad (3.44)$$

因此

$$\|\mathbf{d}_j\| = \|\wp_{ij}\|^{-1} \cdot \|\langle \mathbf{V}_j \rangle\| + \|\wp_{ij}\|^{-1} \cdot \|\wp_i^T\| \cdot \left\| \frac{\partial \ln T}{\partial \mathbf{r}} \right\| \quad (3.45)$$

將上式帶入方程式(3.41)中，熱通量則可以化約成

$$\mathbf{q} = \frac{5}{2} kT \sum_j n_j \langle \mathbf{V}_j \rangle - \lambda_{\text{kin}} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} - nkT \|\wp_i^T\| \cdot \|\wp_{ij}\|^{-1} \cdot \|\langle \mathbf{V}_j \rangle\| \quad (3.46)$$

其中  $\lambda_{\text{kin}}$  為考慮熱擴散(Thermal Diffusion)的位移熱傳導係數(Translation Thermal Conductivity)，可表示為

$$\lambda_{\text{kin}} = \lambda' + nk \left\| \left\{ \rho_i^T \right\} \cdot \left\| \left\{ \rho_{ij} \right\}^{-1} \cdot \left\| \left\{ \rho_j^T \right\} \right. \right. \quad (3.47)$$

為了考慮分子內部自由度對於熱傳導係數的影響，混合氣體中的熱通量必須使用下列方程式

$$\mathbf{q} = \frac{1}{2} \sum_i n_i m_i \langle V_i^2 \mathbf{V}_i \rangle + \sum_i n_i \langle u_i^{\text{int}} \cdot \mathbf{V}_i \rangle \quad (3.48)$$

為了減化計算複雜度，本研究使用歐肯修正法(Eucken Correction)進行計算。因此，混合氣體中的熱通量可表示為

$$\mathbf{q} = -\lambda_{\text{kin}} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} + \sum_i n_i u_i^{\text{int}} \langle \mathbf{V}_i \rangle \quad (3.49)$$

基於前述的假設，氣體分子的擴散速度可簡化為

$$\langle \mathbf{V}_i \rangle = -\frac{n}{n_i} D \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \frac{n_i}{n} \right) \quad (3.50)$$

其中  $D$  為擴散係數。若使用下列等式關係

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \frac{n_i}{n} \right) = \left[ \frac{d}{dT} \left( \frac{n_i}{n} \right) \right] \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} \quad (3.51)$$

故熱傳導係數可表示為

$$\lambda = \lambda_{\text{kin}} + nD \sum_i u_i^{\text{int}} \frac{d}{dT} \left( \frac{n_i}{n} \right) = \lambda_{\text{kin}} + \lambda_{\text{Euck}} \quad (3.52)$$

其中熱傳導係數的修正項可表示為

$$\lambda_{\text{Euck}} = nD c_v^{\text{int}} = nD \left( c_v - \frac{3k}{2m} \right) \quad (3.53)$$

利用使用對混合氣體的半經驗公式，熱傳導係數的修正項可表示為

$$\lambda_{\text{Euck}} = \sum_i n [D_{ii}]_{Sm} [c_{vi}^{\text{int}}]_{Sm} \quad (3.54)$$

其中

$$[D_{ii}]_{Sm} = \frac{D_{ii}}{\sum_j x_j \frac{D_{ii}}{D_{ij}}}, \quad [c_{vi}^{\text{int}}]_{Sm} = x_i c_{vi}^{\text{int}} \quad (3.55)$$

經過進一步的化簡，可得熱傳導係數的修正項為

$$\lambda_{\text{Euck}} = \sum_i x_i \frac{\lambda_i^{\text{Euck}} - \lambda_i}{\sum_j x_j \frac{D_{ii}}{D_{ij}}} \quad (3.56)$$

其中熱傳導係數修正項與熱傳導係數的分量為

$$\lambda_i^{\text{Euck}} = \frac{15}{4} \cdot \frac{R}{M_i} \eta_i \left( \frac{4}{15} \frac{c_{vi}}{R} + \frac{3}{5} \right), \quad \lambda_i = \frac{15}{4} \frac{R}{M_i} \eta_i \quad (3.57)$$

因此熱傳導係數的修正項最後可表示為

$$\lambda_{\text{Euck}} = 3.203 \cdot 10^{-3} \sqrt{T} \sum_{i=1}^v x_i \left( c_{pi} - \frac{5}{2} R \right) \cdot \frac{1}{\sum_{j=1}^v \frac{x_j \sigma_{ij}^2}{\sqrt{M_i + M_j}} \sqrt{2M_i M_j}} \quad (3.58)$$

有關上式的詳細推導可參考[17,18]。若考慮氣體混合物間的化學反應，熱通量可以使用下列方程式表示

$$\mathbf{q} = -\lambda_{\text{kin}} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} + \sum_i H_i \mathbf{W}_i \quad (3.59)$$

其中  $H_i$  為混合氣體中第  $i$  種粒子的焓， $\mathbf{W}_i$  為混合氣體中第  $i$  種粒子的莫耳數通量，該值可表示為

$$\mathbf{W}_i = \frac{n^2}{\rho} \sum_j D_{ij} M_j \frac{\partial x_i}{\partial \mathbf{r}} \quad (3.60)$$

將方程式(3.60)代入方程式(3.59)可得

$$\mathbf{q} = -\lambda_{\text{kin}} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} + \left[ \sum_i \sum_j \frac{n^2}{\rho} D_{ij} M_j H_i \frac{dx_j}{dT} \right] \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} = -(\lambda_{\text{kin}} + \lambda_{\text{re}}) \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} \quad (3.61)$$

若假設  $\mu$  為氣體混合物間的獨立化學反應數目， $n_{ij}$  為化學反應的計量係數，則

$$X^i = \sum_{j=\mu+1}^v n_{ij} X^j, \quad i = 1, 2, \dots, \nu \quad (3.62)$$

若氣體處於熱力學平衡，則

$$\lambda_{\text{re}} \frac{\partial T}{\partial r} = \sum_{i=1}^{\mu} \mathbf{W}_i \Delta H_i, \quad (3.63)$$

其中 $\Delta H_i$ 為第 $i$ 個化學反應的焓。若將氣體粒子間反應視為剛球行為，在使用擴散方程式與假設等體積反應條件下，可得

$$\frac{\Delta H_k}{RT^2} \frac{\partial T}{\partial r} = \sum_{i=1}^{\mu} A_{ik} W_i, \quad k=1, 2, \dots, \mu \quad (3.64)$$

其中

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^{\mu-1} \sum_{\ell=k+1}^{\mu} \frac{\sigma_{k\ell}^2}{\sqrt{2M_k M_\ell}} \cdot \frac{(n_{ik} x_\ell - n_{i\ell} x_k)(n_{jk} x_\ell - n_{j\ell} x_k)}{x_\ell x_k} \quad (3.65)$$

經過化簡，可得

$$\sum_{j=1}^{\mu} y_j A_{ij} = \Delta H_i \quad (3.66)$$

將上式代入方程式(3.63)可得

$$\lambda_{\text{re}} = \frac{372.31}{T^{3/2}} \sum_{i=1}^{\mu} y_i \Delta H_i \quad (3.67)$$

故熱傳導係數可表示為

$$\lambda = \lambda_{\text{kin}} + \lambda_{\text{Euck}} + \lambda_{\text{re}} \quad (3.67)$$



### (三) 碰撞積分與有效碰撞截面

當 $\mu_{ij}$ 為簡化質量(Reduced Mass)時，則碰撞積(Collision Integral)分可表示為[17]

$$\Omega_{ij}^{(l,s)} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}}} \int_0^\infty e^{-x^2} x^{2s+3} \cdot Q_{ij}^{(l)}\left(x\sqrt{\frac{2kT}{\mu_{ij}}}\right) dx \quad (3.68)$$

而有效碰撞截面(Effective Cross Section)可表示為

$$Q_{ij}^{(l)}(g_{ij}) = \int (1 - \cos^l \chi_{ij}) d\sigma_{ij} \quad (3.69)$$

其中 $g_{ij}$ 表碰撞前碰撞粒子的相對速度，表 $\chi_{ij}$ 碰撞後碰撞粒子的相對速度， $\sigma_{ij}$ 表碰撞截面。在剛球模型下，有效碰撞截面與速度無關，可表示為

$$Q_{ij}^{(l)} = \pi \left(\frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}\right) \cdot \left[1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{1 + (-1)^l}{1+l}\right] \quad (3.70)$$

其中 $\sigma_i$ 與 $\sigma_j$ 分別表示粒子 $i$ 與 $j$ 的直徑。因此基於剛球模型的有效碰撞截面可表示為

$$\Omega_{ijk}^{(l,s)} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}}} \frac{(s+1)!}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{1 + (-1)^l}{1+l}\right] \cdot \pi \left(\frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}\right)^2 \quad (3.71)$$

因為

$$\Omega_{ijk}^{(1,1)} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}}} \cdot \pi \left(\frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}\right)^2 \quad (3.72)$$

所以

$$\Omega_{ijk}^{(l,s)} = \frac{(s+1)!}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{1 + (-1)^l}{1+l}\right] \cdot \Omega_{ijk}^{(1,1)} \quad (3.73)$$

將有效碰撞截面的計算公式代入方程式(3.21)與(3.22)，可得

$$\begin{aligned}
\tilde{Q}_{ij}^{(0,0)} &= 8 \sum_{l=1}^{\nu} \frac{n_l M_l}{(M_i + M_l) \cdot \sqrt{M_i M_l}} [n_i M_i (\delta_{ij} - \delta_{il}) - n_j M_j (1 - \delta_{il})] \Omega_{il}^{(1,1)} \\
\tilde{Q}_{ij}^{(0,1)} &= \frac{M_i}{M_j} \tilde{Q}_{ij}^{(1,0)} = -8 \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{3/2} \sum_{l=1}^{\nu} \frac{n_i n_l M_l^2}{(M_i + M_l)^2} \cdot \frac{1}{2} (\delta_{ij} - \delta_{jl}) \Omega_{il}^{(1,1)} \\
\tilde{Q}_{ij}^{(0,2)} &= \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^2 \tilde{Q}_{ij}^{(2,0)} = -\left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{5/2} \sum_{l=1}^{\nu} \frac{n_i n_l M_l^3}{(M_i + M_l)^3} (\delta_{ij} - \delta_{jl}) \Omega_{il}^{(1,1)} \\
\tilde{Q}_{ij}^{(1,1)} &= 8 \left(\frac{M_i}{M_j}\right) \sum_{l=1}^{\nu} \frac{n_i n_l M_l}{(M_i + M_l)^3} [(\delta_{ij} - \delta_{jl}) \left(\frac{30}{4} M_j^2 + \frac{13}{4} M_l^2\right) + 4(\delta_{ij} + \delta_{jl}) M_i M_l] \Omega_{il} \\
\tilde{Q}_{ij}^{(1,2)} &= \frac{M_i}{M_j} \tilde{Q}_{ij}^{(2,1)} = 8 \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{5/2} \sum_{l=1}^{\nu} \frac{n_i n_l M_l^2}{(M_i + M_l)^4} [(\delta_{ij} - \delta_{jl}) \\
&\quad \left(-\frac{21}{4} M_j^2 - \frac{23}{46} M_l^2\right) - 2(\delta_{ij} + \delta_{jl}) M_j M_l] \Omega_{il}^{(1,1)} \\
\tilde{Q}_{ij}^{(2,2)} &= 8 \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{5/2} \sum_{l=1}^{\nu} \frac{n_i n_l M_l}{(M_i + M_l)^5} [(\delta_{ij} - \delta_{jl}) \left(\frac{175}{8} M_j^4 + \frac{459}{8} M_j^2 M_l^2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{433}{64} M_l^4\right) + (\delta_{ij} + \delta_{jl}) (28 M_j^2 + 17 M_l^2) M_l M_j] \Omega_{il} \\
\tilde{Q}_{ij}^{(0,0)} &= \frac{16}{3} \left(\frac{M_i}{M_j}\right) \sum_{l=1}^{\nu} \frac{n_i n_l M_l}{(M_i + M_l)^2} [5 M_j (\delta_{ij} - \delta_{jl}) + 3 M_l (\delta_{ij} + \delta_{jl})] \Omega_{il}^{(1,1)} \\
\tilde{Q}_{ij}^{(0,1)} &= \frac{M_i}{M_j} \tilde{Q}_{ij}^{(1,0)} = \frac{16}{3} \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^2 \sum_{l=1}^{\nu} \frac{n_i n_l M_l^2}{(M_i + M_l)^3} \left[-\frac{7}{2} (\delta_{ij} - \delta_{jl}) M_j \right. \\
&\quad \left. - \frac{3}{2} (\delta_{ij} + \delta_{jl}) M_l\right] \Omega_{il}^{(1,1)} \\
Q_{ij}^{(1,1)} &= \frac{16}{3} \left[\frac{M_i}{M_j}\right]^2 [(\delta_{ij} - \delta_{jl}) (35 M_j^2 + \frac{185}{4} M_l^2) \\
&\quad + (\delta_{ij} + \delta_{jl}) \left(\frac{77}{2} M_j^2 + \frac{51}{4} M_l^2\right)] \Omega_{il}^{(1,1)}
\end{aligned} \tag{3.74}$$

其中

$$\tilde{Q}_{ij}^{(m,m')} = Q_{ij}^{(m,m')} - \frac{n_j}{n_i} \sqrt{\frac{m_j}{m_i}} Q_{ii}^{(m,m')} \delta_{0m} \delta_{0m'} \tag{3.75}$$

在庫倫碰撞部分，本研究使用拉賽福公式(Rutherford's Formula)以計算有效碰撞截面，

$$\sigma(\chi_{ij}) = \frac{b_0^2}{4} \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{\chi_{ij}}{2}} = \frac{(Z_i Z_j)^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \mu_{ij}^2 g_{ij}^4} \cdot \frac{1}{4 \sin^4 \frac{\chi_{ij}}{2}} \quad (3.76)$$

因此由獨立粒子電荷所造成的勢場，可由下列方程式加以描述

$$\Delta\phi = -\frac{1}{\epsilon_0} e \sum_i Z_i n_i \quad (3.77)$$

若假設粒子密度分佈遵循麥克斯威爾-波茲曼分佈 (Maxwell-Boltzmann Law)，

$$n_i = n_{i0} \exp\left(-\frac{Z_i e \phi}{kT}\right) \quad (3.78)$$

其中  $n_{i0}$  表達到平衡時的粒子密度。若假設下列條件成立

$$|Z_i e \phi| \ll kT \quad (3.79)$$

而同時僅考慮方程式(3.78)展開式的前兩項，可得下列近似電中性的條件

$$\sum_i Z_i n_{i0} = 0 \quad (3.80)$$

因此方程式(3.77)可簡化為

$$\Delta\phi = \frac{\phi}{l_d^2} \quad (3.81)$$

其中  $l_d$  表德拜遮蔽距離(Debye Shielding Length)。

$$l_d^2 = \frac{\epsilon_0 kT}{e^2 \sum_i Z_i^2 n_{i0}} \quad (3.82)$$

因此兩粒子間的庫倫碰撞僅發生於  $b \leq l_d$ ，同時本研究中假設  $b_0 \ll l_d$ 。

在碰撞中的最小偏移角可定義為

$$t_g \frac{\chi_{\min}}{2} = \frac{b_0}{l_d} \quad (3.83)$$

所以有效碰撞截面可表示為

$$Q_{ij}^{(l)}(g_{ij}) = 2\pi \frac{(Z_i Z_j)^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \mu_{ij}^2 g_{ij}^4} \int_{\chi_{\min}}^{\pi} \frac{(1 - \cos^l \chi)}{(1 - \cos \chi)^2} \sin \chi d\chi \quad (3.84)$$

使用  $u=1-\cos\chi$  與  $u_m=1-\cos\chi_{\min}$  可得

$$\begin{aligned} l=1 \dots \int_{u_m}^2 \frac{du}{u} &= \ln \frac{2}{u_m} \\ l=2 \dots \int_{u_m}^2 \frac{2-u}{u} du &= 2 \ln \frac{2}{u_m} - 2 + u_m \\ l=3 \dots \int_{u_m}^2 \frac{3-3u+u^2}{u} du &= 3 \ln \frac{2}{u_m} - 4 + 3u_m - \frac{u_m^2}{2} \end{aligned} \quad (3.85)$$

因此可得到下列關係

$$\ln \frac{2}{u_m} = \ln \frac{1 + (\frac{b_0}{l_d})^2}{(\frac{b_0}{l_d})^2} \approx \ln \left( \frac{l_d}{b_0} \right)^2 = 2 \ln \frac{l_d}{b_0} = 2 \ln \Lambda \quad (3.86)$$

同時由於

$$\left( \frac{b_0}{l_d} \right)^2 = \frac{(Z_i Z_j)^2 e^6 \sum_i Z_i^2 n_i}{(4\pi\epsilon_0)^2 \epsilon_0 \mu_{ij}^2 kT g_{ij}^4} \quad (3.87)$$

以及相對速度具有對數相依性

$$\mu_{ij} g_{ij}^2 \approx 3kT \quad (3.88)$$

故可獲得以下的庫倫對數(Coulomb Logarithm)關係

$$\ln \Lambda = \ln \left[ \frac{12\pi}{Z_i Z_j \sqrt{\sum_k Z_k^2 n_k}} \left( \frac{\epsilon_0 kT}{e^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (3.89)$$

在省略  $u_m$  的次方項後，對於  $l=1, 2, 3$  的條件下，可得

$$\begin{aligned} Q_{ij}^{(1)}(g_{ij}) &= \frac{(Z_i Z_j)^2 e^4}{4\pi\epsilon_0^2 \mu_{ij}^2 g_{ij}^4} \ln \Lambda \\ Q_{ij}^{(2)}(g_{ij}) &= Q_{ij}^{(1)}(g_{ij}) \cdot \left( 2 - \frac{1}{\ln \Lambda} \right) \end{aligned} \quad (3.90)$$

$$Q_{ij}^{(3)}(g_{ij}) = Q_{ij}^{(1)}(g_{ij}) \cdot \left(3 - \frac{2}{\ln \Lambda}\right)$$

所以碰撞積分可表示為

$$\Omega_{ij}^{(1,s)} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}}} \cdot \frac{(Z_i Z_j)^2 e^4 \ln \Lambda}{16\pi\epsilon_0^2 (kT)^2} \int_0^\infty e^{-x^2} \cdot x^{2s-1} dx = \Omega_{ij}^{(1,1)}(s-1)! \quad (3.91)$$

同時

$$\begin{aligned} \Omega_{ij}^{(2,s)} &= (s-1)! \left(2 - \frac{1}{\ln \Lambda}\right) \Omega_{ij}^{(1,1)} \\ \Omega_{ij}^{(3,s)} &= (s-1)! \left(3 - \frac{2}{\ln \Lambda}\right) \Omega_{ij}^{(1,1)} \end{aligned} \quad (3.92)$$

將有效碰撞截面的計算公式代入方程式(3.21)與(3.22)可得基於庫倫碰撞的關係是如下所示

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{ij}^{(0,0)} &= 8 \sum_{l=1}^v \frac{n_l M_l}{(M_i + M_l) \sqrt{M_i M_l}} [n_i M_i (\delta_{ij} - \delta_{il}) - n_j M_j (1 - \delta_{il})] \Omega_{il}^{(1,1)} \\ \tilde{Q}_{ij}^{(0,1)} &= \frac{M_j}{M_i} \tilde{Q}_{ij}^{(1,0)} = -8 \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{3/2} \sum_{l=1}^v \frac{n_i n_l M_l^2}{(M_i + M_l)^2} (\delta_{ij} - \delta_{jl}) \left(-\frac{3}{2}\right) \Omega_{il}^{(1,1)} \\ \tilde{Q}_{ij}^{(0,2)} &= \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^2 Q_{ij}^{(2,0)} = 15 \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{5/2} \sum_{l=1}^v \frac{n_i n_l M_l^3}{(M_i + M_l)^3} (\delta_{ij} - \delta_{jl}) \Omega_{il}^{(1,1)} \\ \tilde{Q}_{ij}^{(1,1)} &= 8 \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{3/2} \sum_{l=1}^v \frac{n_i n_l M_l}{(M_i + M_l)^3} [(\delta_{ij} - \delta_{il}) \left(\frac{30}{4} M_j^2 + \frac{13}{4} M_l^2\right) \\ &\quad + (\delta_{ij} + \delta_{jl}) \cdot 2 \left(2 - \frac{1}{\ln \Lambda}\right) M_j M_l] \Omega_{il}^{(1,1)} \quad (3.93) \\ \tilde{Q}_{ij}^{(1,2)} &= \left(\frac{M_i}{M_j}\right) \tilde{Q}_{ij}^{(2,1)} = 8 \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{5/2} \sum_{l=1}^v \frac{n_i n_l M_l^2}{(M_i + M_l)^4} [(\delta_{ij} - \delta_{jl}) \\ &\quad \left(\frac{63}{4} M_j^2 + \frac{69}{16} M_l^2\right) + (\delta_{ij} + \delta_{jl}) \cdot 3 \left(2 - \frac{1}{\ln \Lambda}\right) M_j M_l] \Omega_{il}^{(1,1)} \\ \tilde{Q}_{ij}^{(2,2)} &= 8 \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{5/2} \sum_{l=1}^v \frac{n_i n_l M_l}{(M_i + M_l)^5} \{(\delta_{ij} - \delta_{jl}) \left[\frac{175}{8} M_j^4 + \left(\frac{411}{8} - \frac{4}{\ln \Lambda}\right) M_j^2 M_l^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{433}{64} M_l^4\right] + (\delta_{ij} + \delta_{jl}) \cdot \left(2 - \frac{1}{\ln \Lambda}\right) \left(14 M_j^2 + \frac{17}{2} M_l^2\right)\right\} \Omega_{il}^{(1,1)} \end{aligned}$$

$$Q^{(0,0)} = \frac{16}{3} \cdot \frac{M_i}{M_j} \sum_{l=1}^v \frac{n_i n_l M_l}{(M_i + M_l)} \left[ 5M_j (\delta_{ij} - \delta_{jl}) + \frac{3}{2} \left( 2 - \frac{1}{\ln \Lambda} \right) (\delta_{ij} + \delta_{jl}) M_l \right] \Omega_{il}^{(1,1)}$$

$$Q^{(0,1)} = \frac{M_i}{M_j} Q_{ij}^{(1,0)} = \frac{16}{3} \left( \frac{M_i}{M_j} \right)^2 \sum_{l=1}^v \frac{n_i n_l M_l^2}{(M_i + M_l)^3} [(\delta_{ij} - \delta_{jl}) \cdot \frac{21}{2} M_j + (\delta_{ij} + \delta_{jl}) \frac{9}{4} \left( 2 - \frac{1}{\ln \Lambda} \right) M_l] \Omega_{il}^{(1,1)}$$

$$\tilde{Q}^{(1,1)} = \frac{16}{3} \left( \frac{M_i}{M_j} \right)^2 \sum_{l=1}^v \frac{n_i n_l M_l}{(M_i + M_l)^4} \{ (\delta_{ij} - \delta_{jl}) [35M_j^2 + \left( \frac{185}{4} - \frac{12}{\ln \Lambda} \right) M_l^2] M_j + (\delta_{ij} + \delta_{jl}) \left( 2 - \frac{1}{\ln \Lambda} \right) \left( \frac{77}{4} M_j^2 + \frac{51}{8} M_l^2 \right) M_l \} \Omega_{il}^{(1,1)}$$

#### 四、流場計算之數值離散方法[13]

若使用有限體積法的離散方式，將上述之偏微分方程式對任意控制單元積分，則可得到下列之通式：

$$\int_S \rho \phi (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dS = \int_S \Gamma (\nabla \phi \cdot \mathbf{n}) dS + \int_V S_\phi dV \quad (4.1)$$

其中  $\mathbf{V}$  表一控制體， $\mathbf{S}$  表包圍該控制體之控制面， $\mathbf{n}$  為控制面上之法線向量， $\phi$  表一廣義之變量， $\mathbf{u}$  表速度向量， $\Gamma$  表廣義之擴散係數， $S_\phi$  表廣義之源項。若使用皮卡疊代法(Picard iteration method)，在相鄰控制體界面之廣義對流項  $C_f$  可以利用下式加以近似：

$$C_f = \int_S \rho \phi (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dS \approx \dot{m}_f \phi_f \quad (4.2)$$

其中  $\dot{m}_f$  表示在相鄰控制體界面上質量流率， $\phi_f$  表示在相鄰控制體界面上該物理量平均值，該值可由高階或低階進似法加以決定。廣義擴散項  $D_f$  可以利用下式加以近似：

$$D_f = \int_S \Gamma (\nabla \phi \cdot \mathbf{n}) dS \approx \Gamma_f \nabla \phi_f S_f \quad (4.3)$$

其中  $\Gamma_f$  表示在相鄰控制體界面上廣義擴散係數， $S_f$  表示在相鄰控制體界面面積， $\nabla \phi_f$  表示在相鄰控制體界面上該物理量梯度平均值，該值可由高階或低階進似法加以決定。源項  $Q_P$  可以利用下式加以近似：

$$Q_P = \int_V S_\phi dV \approx (S_\phi)_P V_P \quad (4.4)$$

其中  $(S_\phi)_P$  表示在節點 P 處的源項值平均值， $V_P$  表示包含節點 P 的控制體積。若將該通式中的各項以鄰近控制體中心的節點值加以近似，便可得到下列聯立方程組：

$$a_p \phi_p = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + B_p \quad (4.5)$$

其中  $a$  表聯立方程組中之係數， $B$  表聯立方程組中之右手項， $p$  與  $nb$  分別表節點的位置，利用求解線性聯立方程組的數值方法，來求解上述之聯立方程組便可求得流場中之速度、壓力、電位差、紊流特性與溫度等物理量。



## 五、基於計算區間分割之平行化

### (一) 分散式記憶體系統

本研究在分散式記憶體系統(Distributed-Memory System)採用的平行化技術為基於計算區間分割之平行化[14]，如圖 1 中實線標示區域所示。在這類的平行分割中，為了簡化不同區塊間資料傳遞與儲存的問題，通常在區塊實際邊界上使用虛擬網格的技巧，如圖 1 中虛線標示區域。不同區塊的內容通常儲存於不同的電腦記憶體中，各區塊中虛擬網格的資料交換與更新，必須藉由網路的資料交換達成，如利用呼叫現有通訊程式庫內的副程式，以完成疊代計算間不同區塊資料交換的工作。圖 2 說明依據計算工作本質的差異(如計算工作數量是否固定、通訊型態是否具結構性、通訊時間是否固定、通訊是否頻繁等)，以選擇計算工作與硬體間的映射關係。本研究在序列式程式碼中加入 MPI 程式庫的副程式，以達到不同區塊(電腦)間的資料交換，得以確保整體流場計算的耦合性。

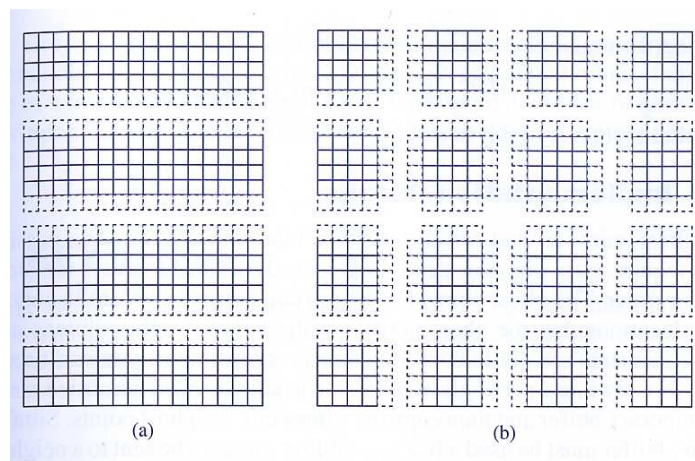


圖 1：相鄰區塊間虛擬網格與實體網格示意圖[14]

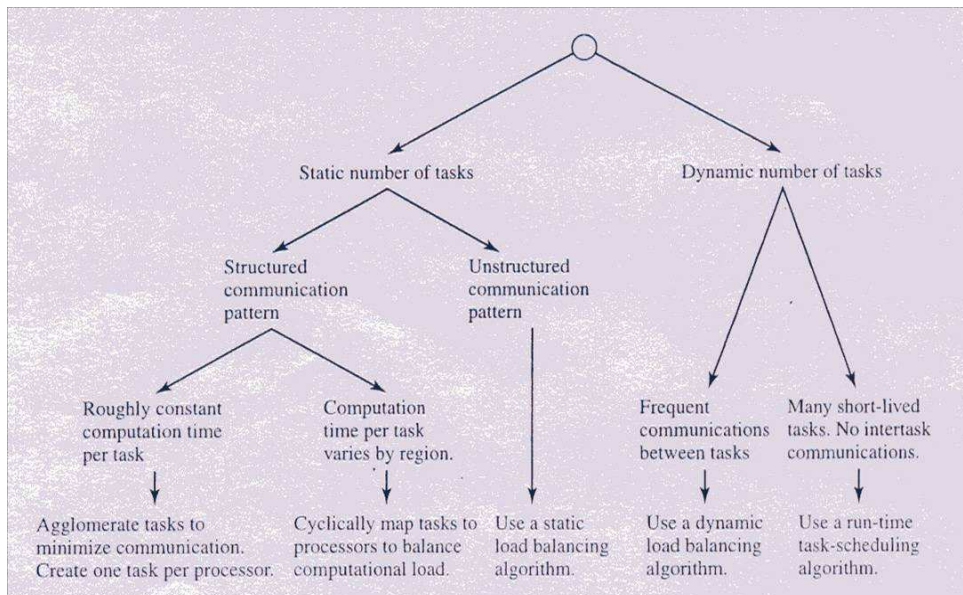


圖 2：計算工作映射關係圖[14]

## (二) 分享式記憶體系統

本研究也比較了流場計算程式效能在分享式記憶體系統 (Share-Memory System) 與分散式記憶體系統的差異。兩者相同處在於皆具有許多計算核心以提供計算能力，兩者相異處在於特定記憶體位置可被某些或全部計算核心存取。本研究所使用的分散式記憶體系統為以高速網路相連接之多重電腦系統 (Multicomputer)，每一個電腦單元屬於集中式的多處理器系統 (Centralized Multiprocessor)，電腦單元中的中央處理器 (CPU) 為計算單元，如圖 5.3 所示。本研究所使用的分散式記憶體系統為使用 GPUPU (General-Purpose Computing on Graphics Processing Units) 做法的運算系統 [19]，該系統的主要運算單元為 GPU (Graphics Processing Unit)，如圖 3 所示。GPU 運算單元由數個串流多重處理器 (Streaming Multiprocessor)，每個串流多重處理器 (Streaming Multiprocessor) 中又內含數個串流處理器 (Streaming Processor)，而串流處理器為最基礎的計算單元，如圖 4 所示。串流多重處理器則採用單指令多執行緒的架構 (SIMT, Single Instruction Multiple Thread)，因此能進行大規模的平行化計算。由於本研究使用 Nvidia 的硬體為開發平台，必須使用統一計算架構 (CUDA, Compute Unified Device Architecture) 為其軟體開發平台 [20]。為了避免直接使用統一計算架構開發流場計算程式的困難度，本研究以序列式的程式碼為起點，利用 CUDA 轉換套件 HMPP，將原始高階程式碼轉換

成 CUDA 架構。HMPP 是一種多核心技術的指令集，並非一種新的程式語言，而是使用指令集經過編譯後，可以很快速地將現有的程式(C / C++ / Fortran)轉譯成 CUDA、CAL/IL，甚至是 OpenCL 軟體架構[21]。如此可以縮短將現有程式平行化至多和平臺的時間，其優點在於可以將平行程式進行步進式的優化，在維護現有的序列式程式為基礎下，無須為了 GPU 硬體版本進行多重維護。

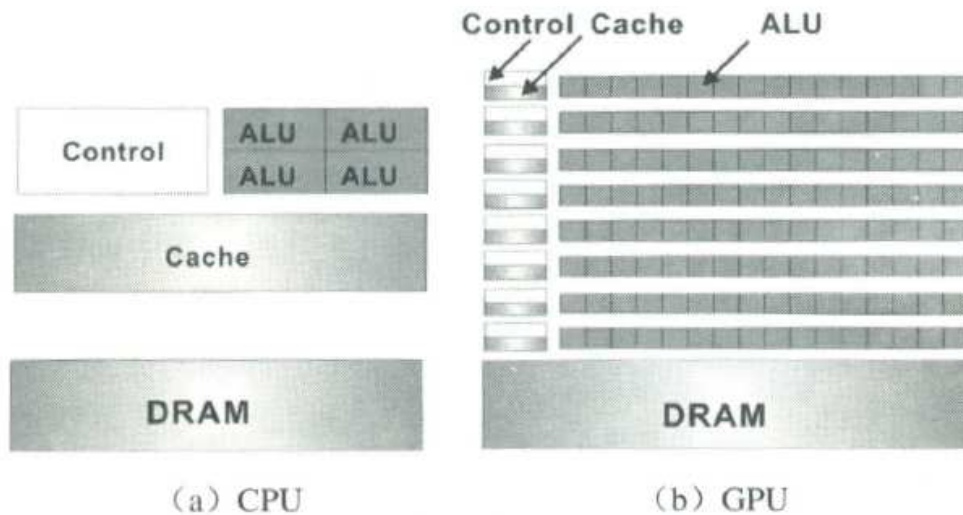


圖 3：中央處理器與繪圖處理器的差異圖[19]

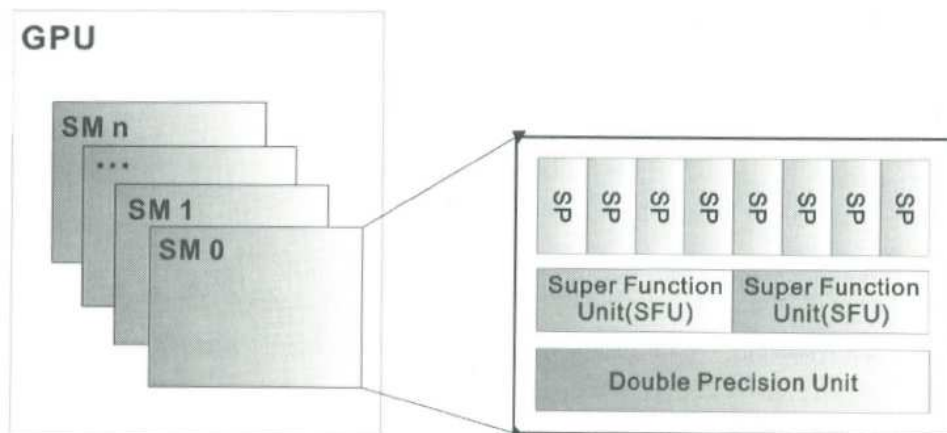


圖 4：串流多重處理器與串流處理器關係圖[19]

## 參、主要發現與結論

### 一、電漿氣體傳輸係數

圖 5 與圖 6 分別說明在一大氣壓條件下水蒸氣電漿氣體物種濃度在低溫( $500\text{ K} \leq T \leq 20000\text{ K}$ )與高溫( $20000\text{ K} \leq T \leq 20000\text{ K}$ )範圍的分佈。本研究根據[22]的建議，在低溫範圍考慮下列主要物種： $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{HO}_2$ 、 $\text{H}_2\text{O}_2$ 、 $\text{OH}$ 、 $\text{OH}^+$ 、 $\text{O}_2$ 、 $\text{O}$ 、 $\text{O}^+$ 、 $\text{O}^{++}$ 、 $\text{O}^-$ 、 $\text{H}_2$ 、 $\text{H}_2^+$ 、 $\text{H}$ 、 $\text{H}^+$ 、 $\text{H}^-$ 以及電子；在高溫範圍則考慮下列主要物種： $\text{O}$ 、 $\text{O}^+$ 、 $\text{O}^{++}$ 、 $\text{O}^{+++}$ 、 $\text{O}^{++++}$ 、 $\text{O}^{+++++}$ 、 $\text{O}^{++++++}$ 、 $\text{H}$ 、 $\text{H}^+$ 以及電子( $e^-$ )。圖 7 至圖 18 分別說明在  $P=1.3\text{ atm}$ 、 $P=1.5\text{ atm}$ 、 $P=1.7\text{ atm}$ 、 $P=2.0\text{ atm}$ 、 $P=2.5\text{ atm}$ 、及  $P=3.0\text{ atm}$  條件下水蒸氣電漿氣體物種濃度在低溫( $500\text{ K} \leq T \leq 20,000\text{ K}$ )與高溫( $20,000\text{ K} \leq T \leq 50,000\text{ K}$ )範圍的分佈。圖 19 至圖 24 分別說明在  $P=1.0\text{ atm}$ 、 $P=1.3\text{ atm}$ 、 $P=1.5\text{ atm}$ 、 $P=1.7\text{ atm}$ 、 $P=2.0\text{ atm}$ 、 $P=2.5\text{ atm}$ 、及  $P=3.0\text{ atm}$  條件下水蒸氣電漿氣傳輸係數與溫度 ( $500\text{ K} \leq T \leq 50,000\text{ K}$ ) 的關係。由圖 19 至圖 24 的計算結果顯示：電傳導係數有隨溫度增大的趨勢，但在溫度為  $30,000\text{ K}$  附近具有局部極大值；黏性係數則先隨著溫度增加，但在溫度為  $10,000\text{ K}$  左右達到極大值，然後黏性係數隨著溫度升高而減小；熱傳導係數也具有隨著溫度增加的特性，但在溫度為  $4,000\text{ K}$ 、 $15,000\text{ K}$  與  $35,000\text{ K}$  附近時，熱傳導係數顯示具有局部極大值的特性。由圖 25 為本研究與先前研究[23]計算結果的比較，該圖顯示兩者的計算結果具有定性與定量的一致性，說明本研究方法的可靠性。因此本研究完成建立計算水蒸氣電漿氣體傳輸係數的方法，並完成在  $P=1.0\text{ atm}$  至  $3.0\text{ atm}$  與  $500\text{ K} \leq T \leq 50,000\text{ K}$  條件下，水蒸氣電漿氣體傳輸係數的計算工作，同時與先前研究比較具有良好的一致性。

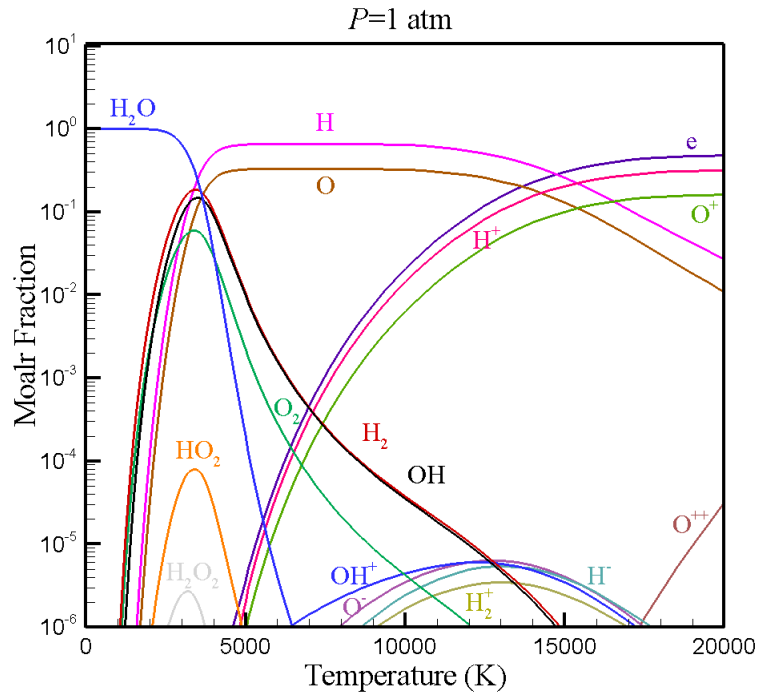


圖 5：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=1 \text{ atm}$ ,  $500 \text{ K} \leq T \leq 20,000 \text{ K}$ )

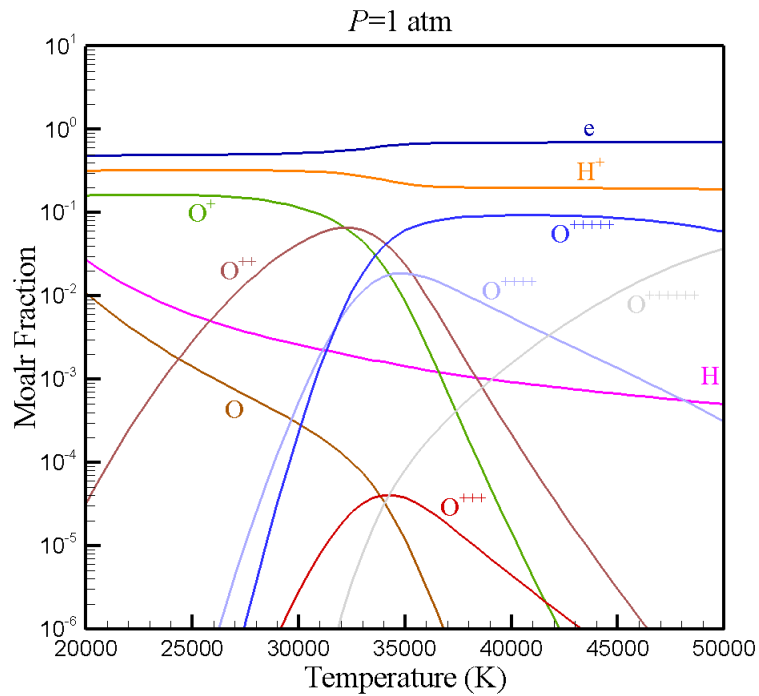


圖 6：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=1 \text{ atm}$ ,  $20,000 \text{ K} \leq T \leq 50,000 \text{ K}$ )

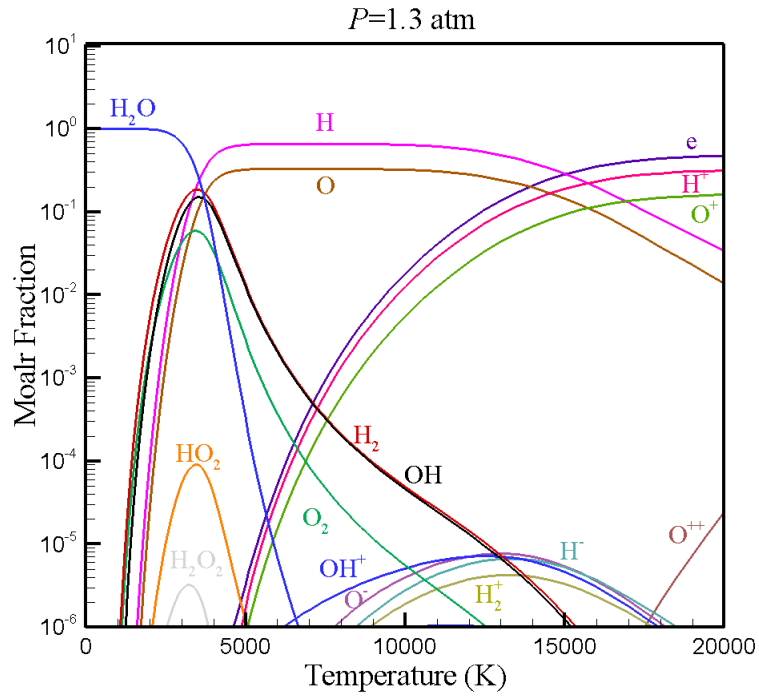


圖 7：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=1.3 \text{ atm}$ ,  $500 \text{ K} \leq T \leq 20,000 \text{ K}$ )

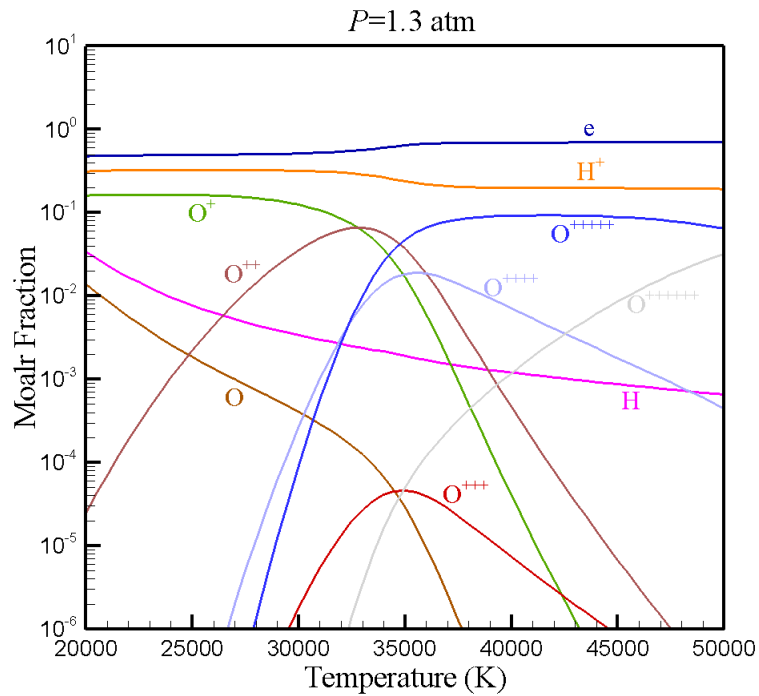


圖 8：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=1.3 \text{ atm}$ ,  $20,000 \text{ K} \leq T \leq 50,000 \text{ K}$ )

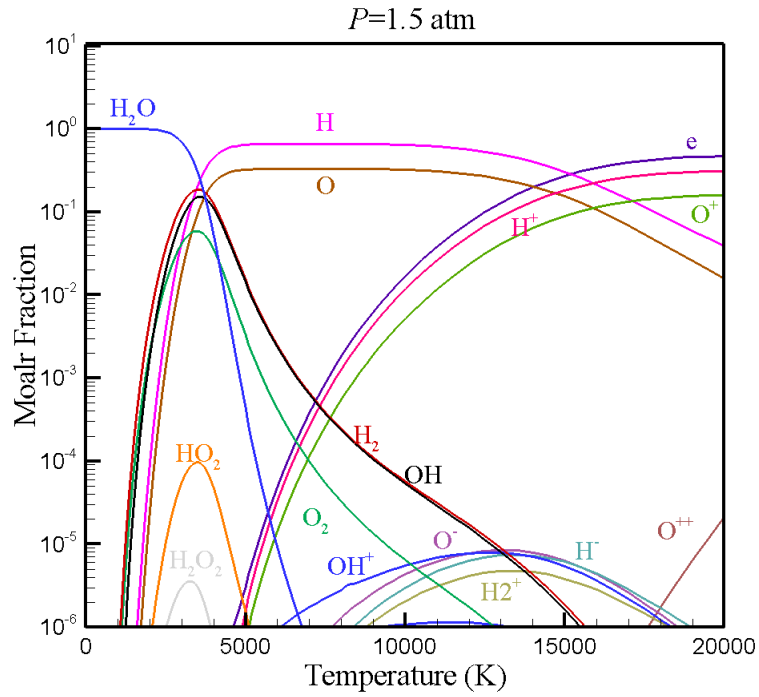


圖 9：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=1.5 \text{ atm}$ ,  $500 \text{ K} \leq T \leq 20,000 \text{ K}$ )

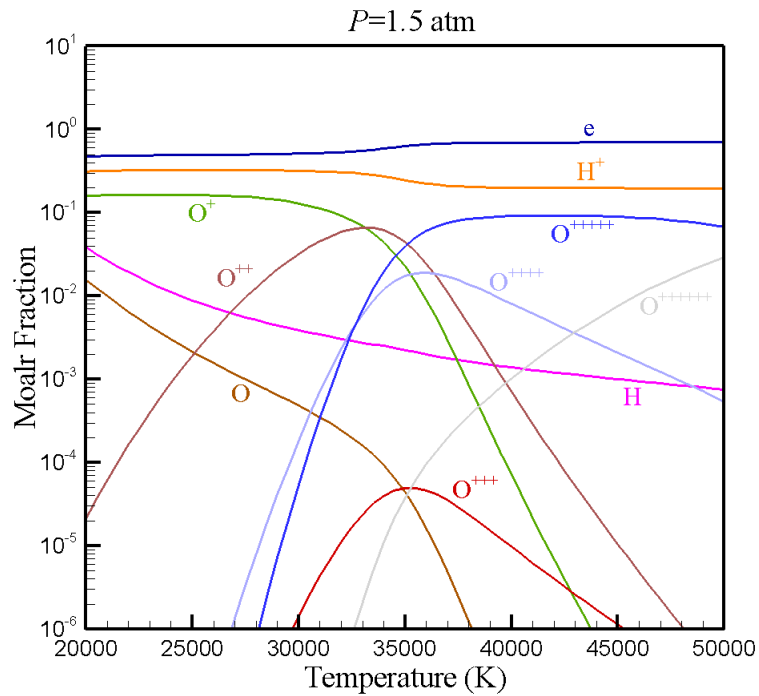


圖 10：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=1.5 \text{ atm}$ ,  $20,000 \text{ K} \leq T \leq 50,000 \text{ K}$ )



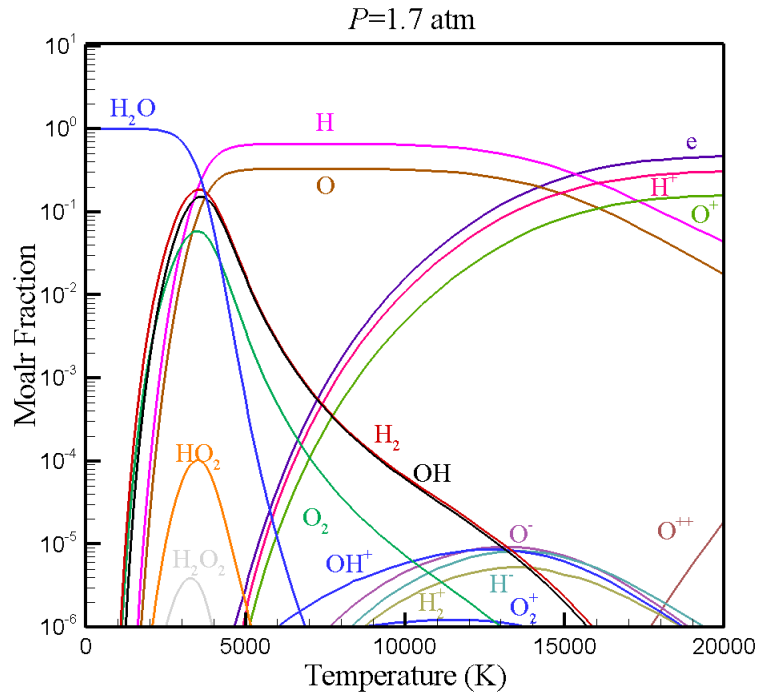


圖 11：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=1.7 \text{ atm}$ ,  $500 \text{ K} \leq T \leq 20,000 \text{ K}$ )

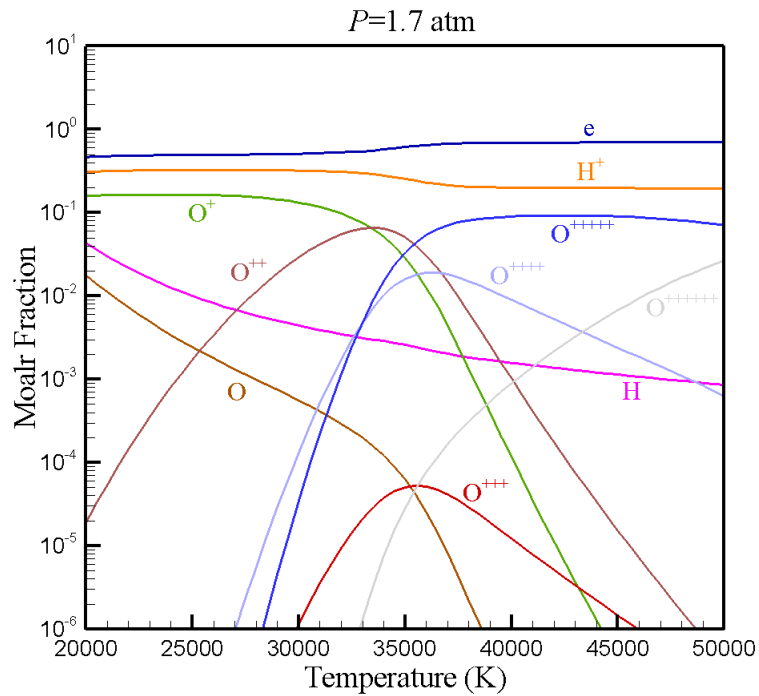


圖 12：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=1.7 \text{ atm}$ ,  $20,000 \text{ K} \leq T \leq 50,000 \text{ K}$ )

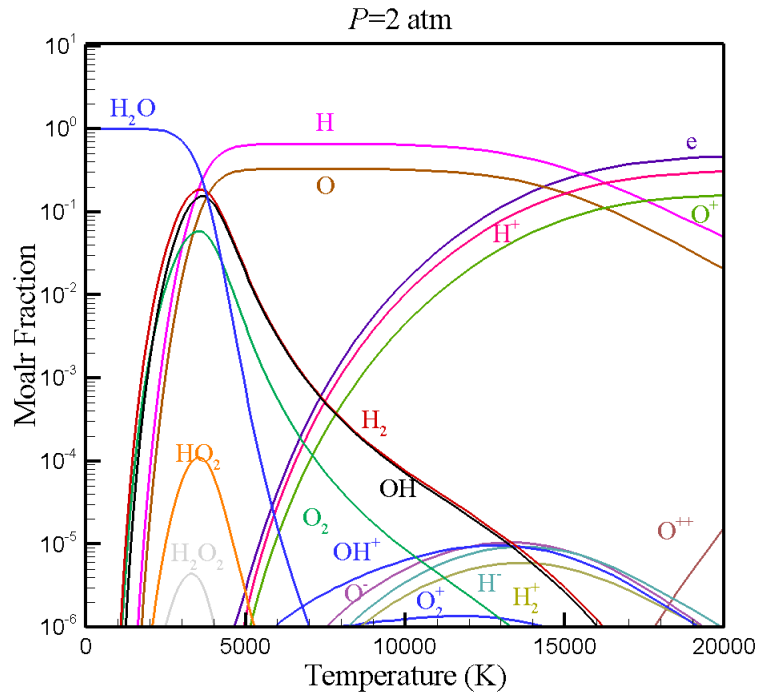


圖 13：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=2 \text{ atm}$ ,  $500 \text{ K} \leq T \leq 20,000 \text{ K}$ )

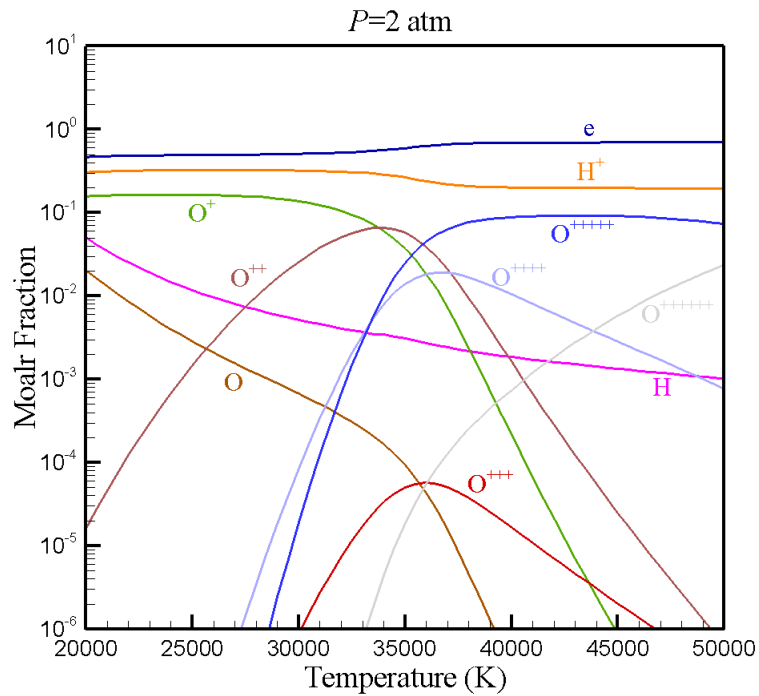


圖 14：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=2 \text{ atm}$ ,  $20,000 \text{ K} \leq T \leq 50,000 \text{ K}$ )

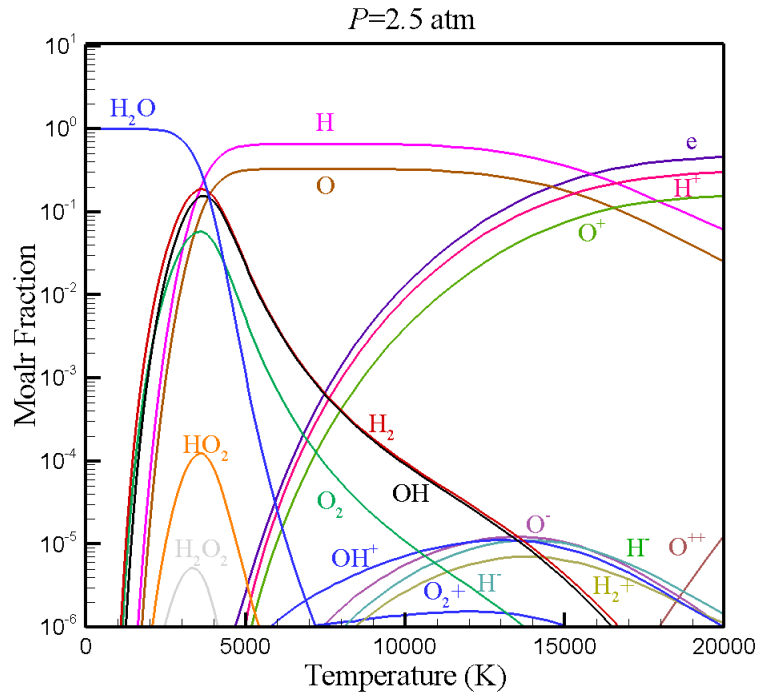


圖 15：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=2.5 \text{ atm}$ ,  $500 \text{ K} \leq T \leq 20,000 \text{ K}$ )

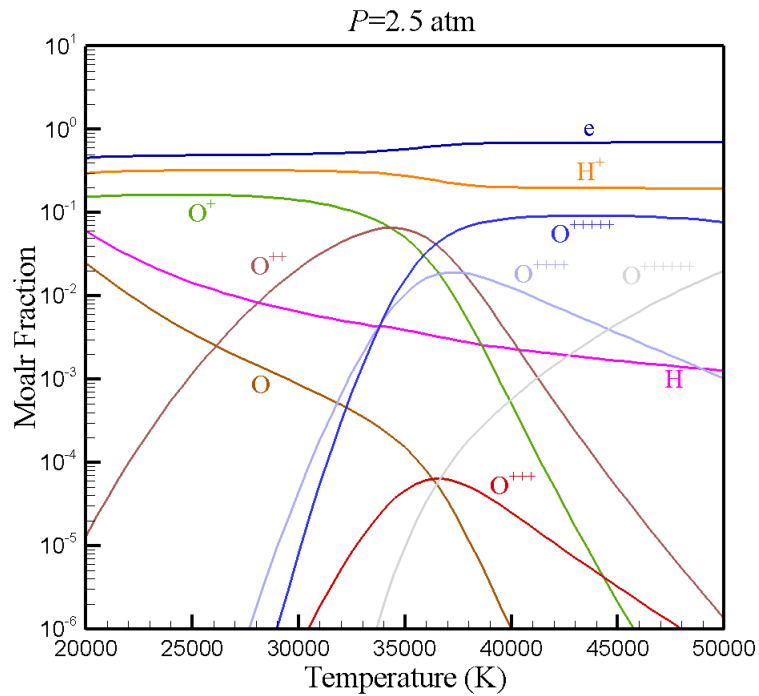


圖 16：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=2.5 \text{ atm}$ ,  $20,000 \text{ K} \leq T \leq 50,000 \text{ K}$ )

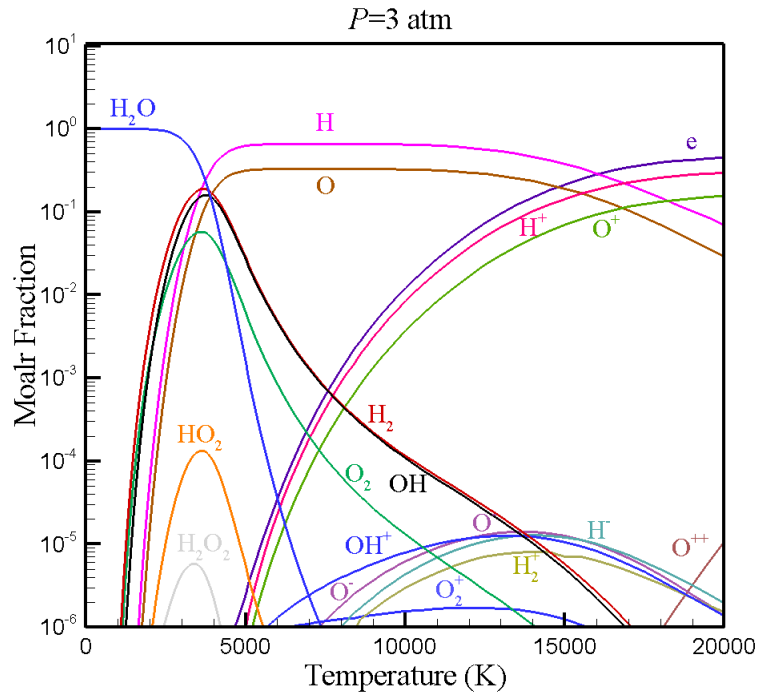


圖 17：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=3 \text{ atm}$ ,  $500 \text{ K} \leq T \leq 20,000 \text{ K}$ )

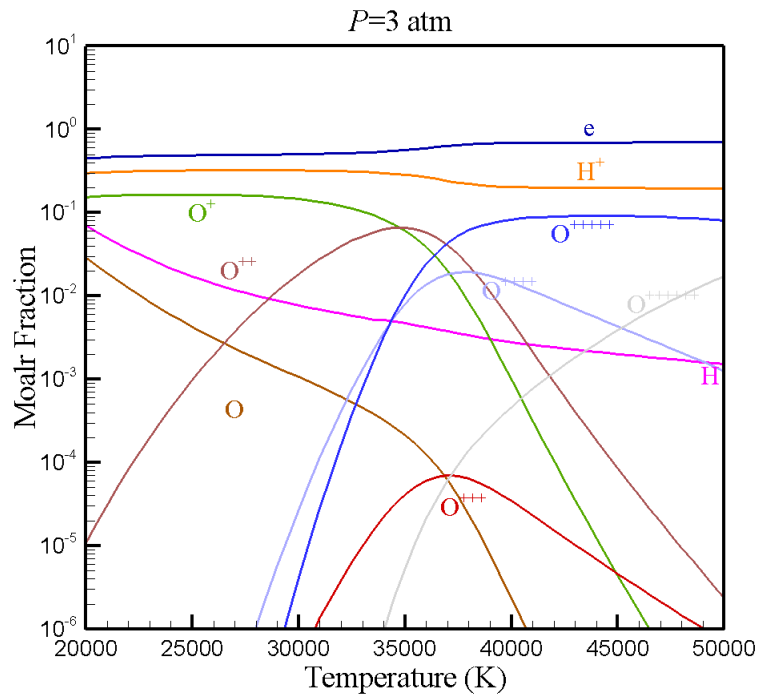


圖 18：水電漿氣體物種濃度分佈( $P=3 \text{ atm}$ ,  $20,000 \text{ K} \leq T \leq 50,000 \text{ K}$ )

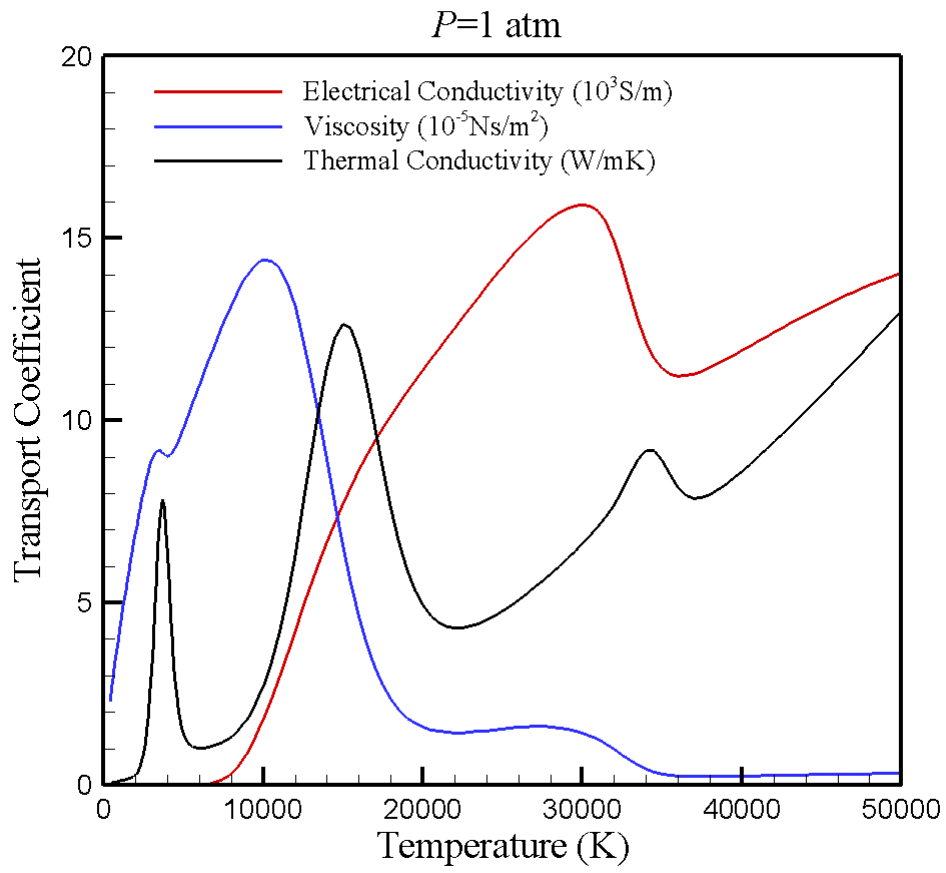


圖 19：水電漿氣體傳輸係數與溫度關係圖( $P=1 \text{ atm}$ )

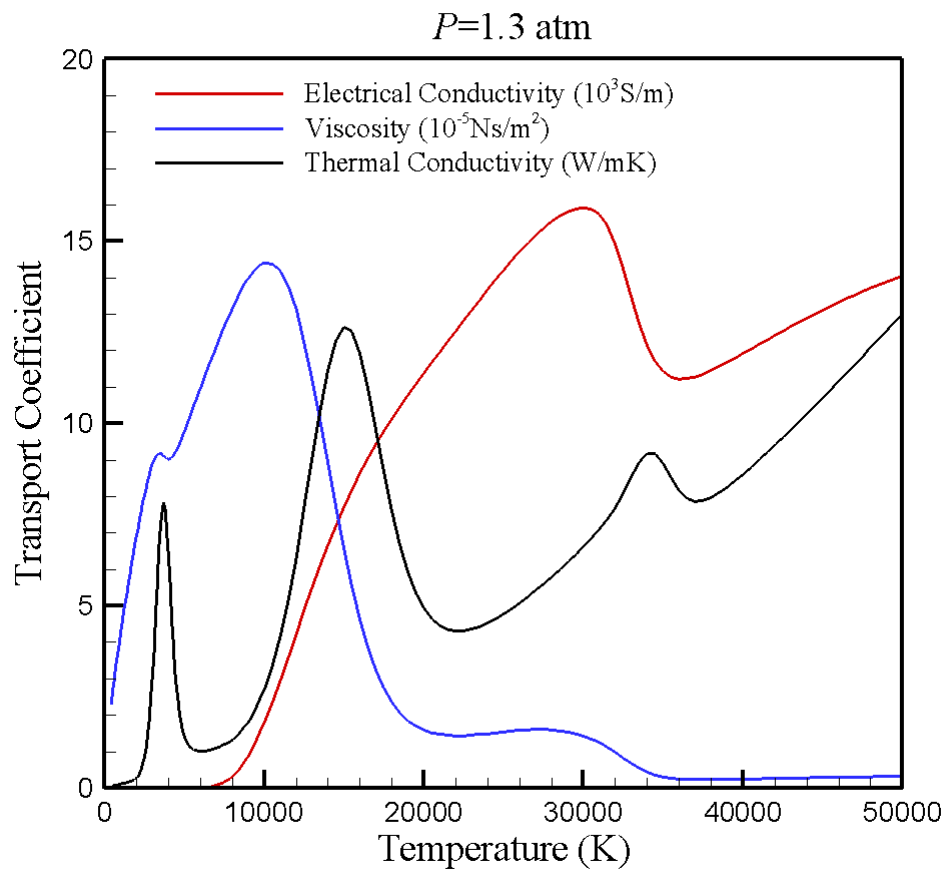


圖 20：水電漿氣體傳輸係數與溫度關係圖( $P=1.3 \text{ atm}$ )

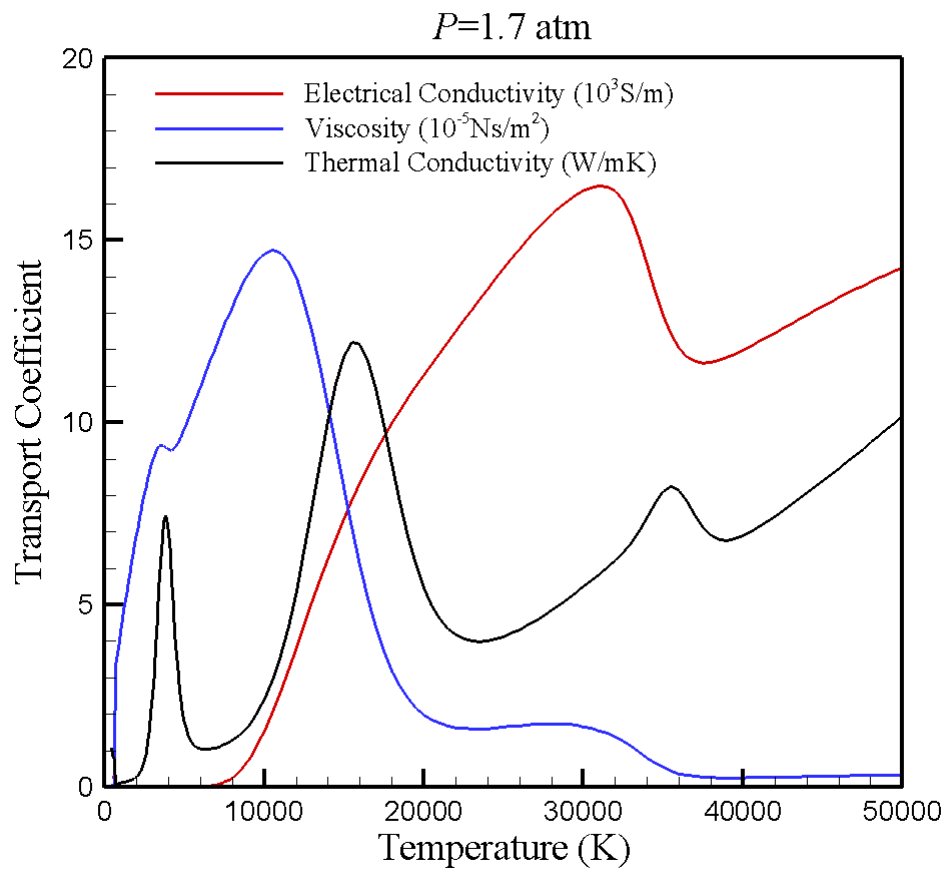


圖 21：水電漿氣體傳輸係數與溫度關係圖( $P=1.7 \text{ atm}$ )

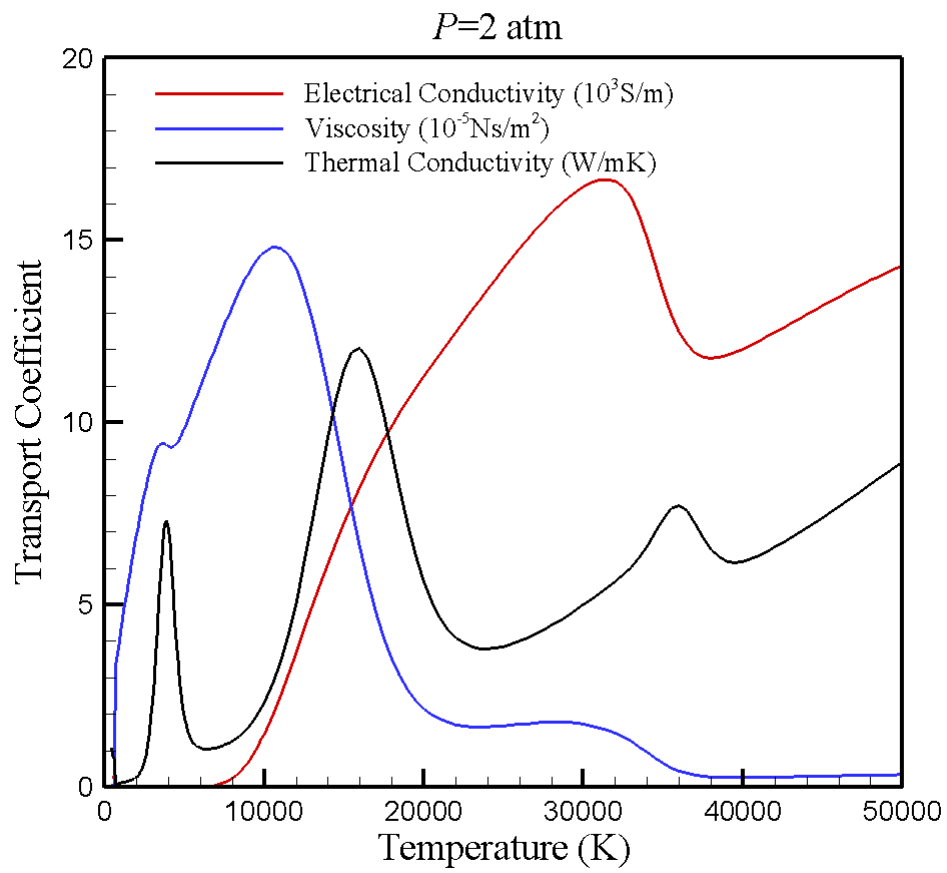


圖 22：水電漿氣體傳輸係數與溫度關係圖( $P=2 \text{ atm}$ )



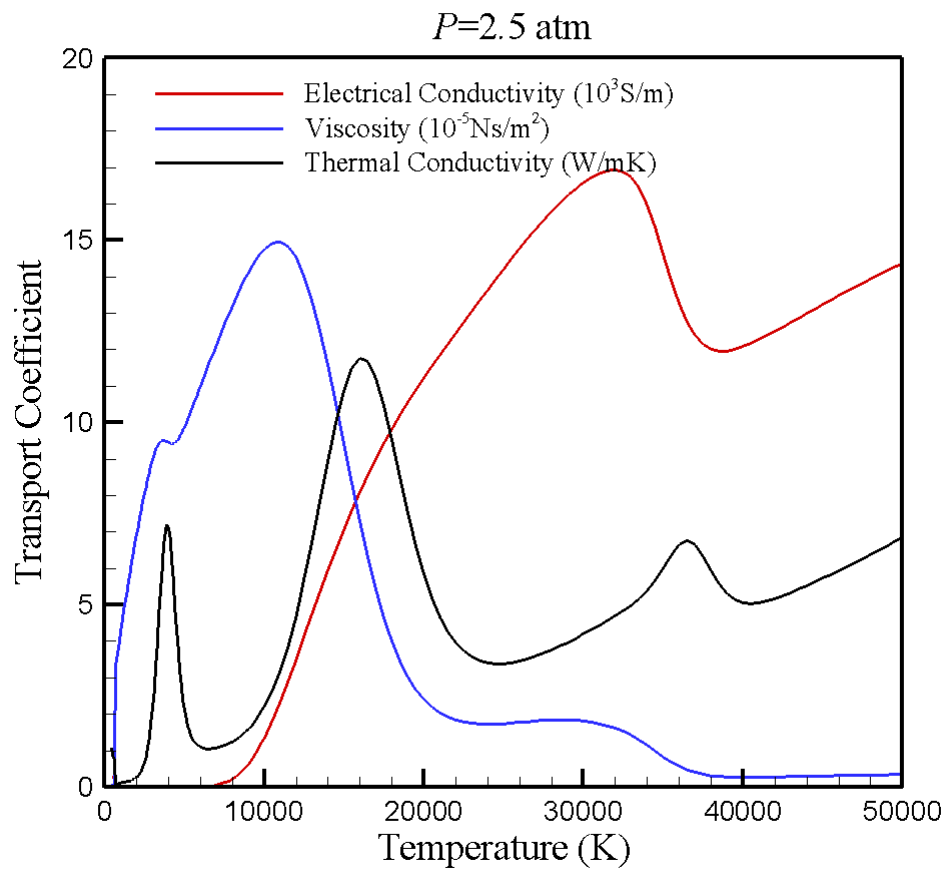


圖 23：水電漿氣體傳輸係數與溫度關係圖( $P=2.5 \text{ atm}$ )

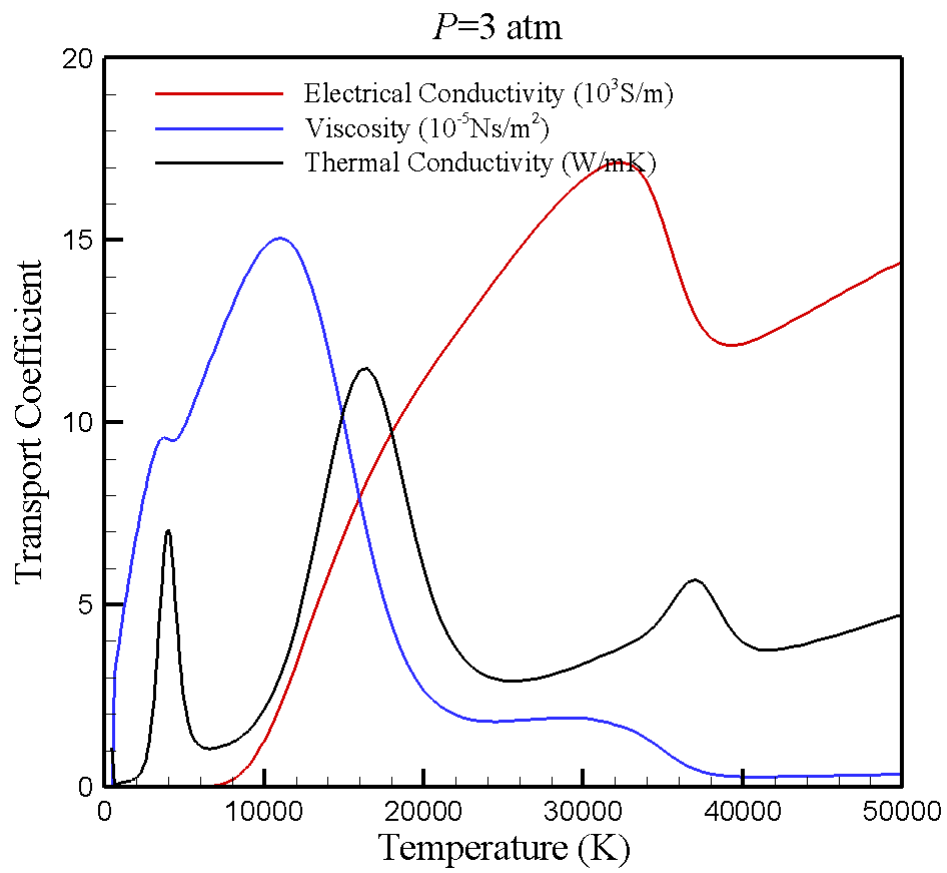


圖 24：水電漿氣體傳輸係數與溫度關係圖( $P=3 \text{ atm}$ )

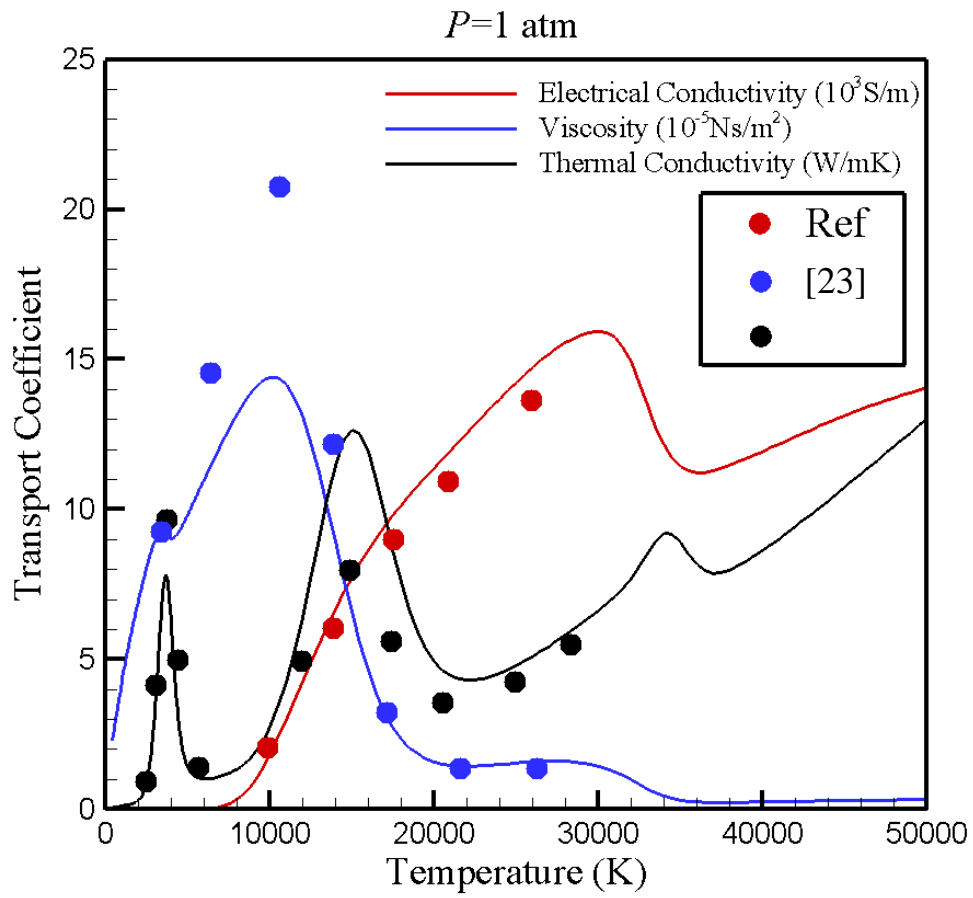


圖 25：水電漿氣體傳輸係數與溫度關係圖( $P=1 \text{ atm}$ )

## 二、電漿火炬流場

本研究在獲得水電漿傳輸係數與溫度的關係後，本研究進行直流電漿火炬內部流場的計算。為簡化計算過程，本研究使用二維軸對稱流場假設。圖 26 為本研究模擬的 100 kW 直流電漿火炬實體圖，火炬全長為 503mm，陰極長度為 150mm，陽極長度為 350mm，進氣寬度為 3mm，火炬直徑為 18mm，水蒸氣的進氣溫度為 180°C。圖 27 為本研究所使用的計算空間，cd 為陰極位置，ef 為進氣位置，gh 為陽極位置，ij 為火炬出口。圖 28 為輸出功率為 80 kW 與進氣流量為 1.8 g/s 條件下(此時總電流為 180A)，直流電漿火炬內部流場的速度分佈圖，其中圖左為軸向速度等高線，而圖右為切向速度等高線，兩者皆顯示延軸向分佈的特性。本研究計算結果顯示軸向速度最高可達 4,000 m/s，而在靠近中心軸的切向速度極大值約在 2,000 m/s 左右。圖 29 為電漿火炬內部流場溫度與電流密度分佈圖，其中圖左為溫度等高線，而圖右為電流密度等高線，在進氣口下方兩者皆具有等高線集中的特性。本研究計算結果顯示火炬內部氣體溫度最高可達 32,000 K，而在靠近中心軸的電流密度極大值約在 100 A/mm<sup>2</sup> 左右。圖 30 為電漿火炬內部流場速度與電流密度向量分佈圖，其中圖左為速度向量，而圖右為電流密度向量，兩者除了在進氣口下方區域外，皆具有平行於軸向的趨勢。圖 31 為電漿火炬內部流場之誘導磁場與電壓分佈圖，其中圖左為誘導磁場等高線，除了進氣口下方區域外，誘導磁場具有平行於軸向的趨勢，而圖右為電壓等高線，其等高線方向垂直於火炬中心軸方向。使用本研究獲得之水蒸氣電漿氣體傳輸係數，經由相關電漿火炬流場計算，本研究完成進一步驗證氣體傳輸係數的合理性。

## 100 kW Steam Torch (@ INER)

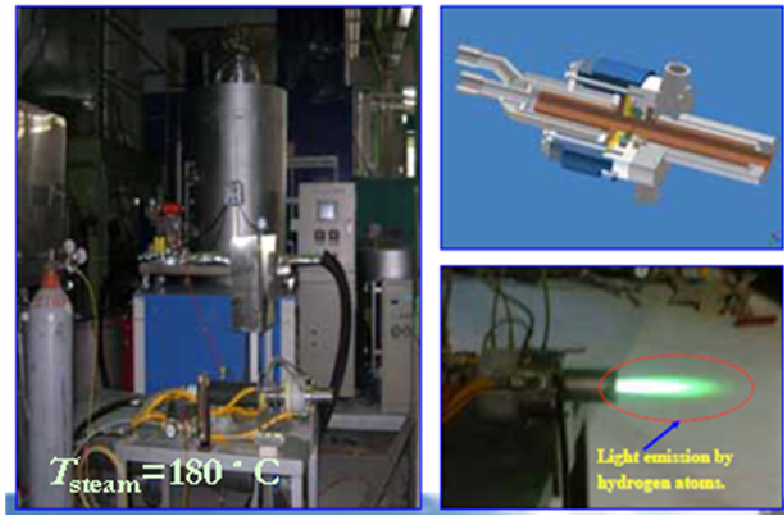


圖 26：100kW 水蒸氣電漿火炬

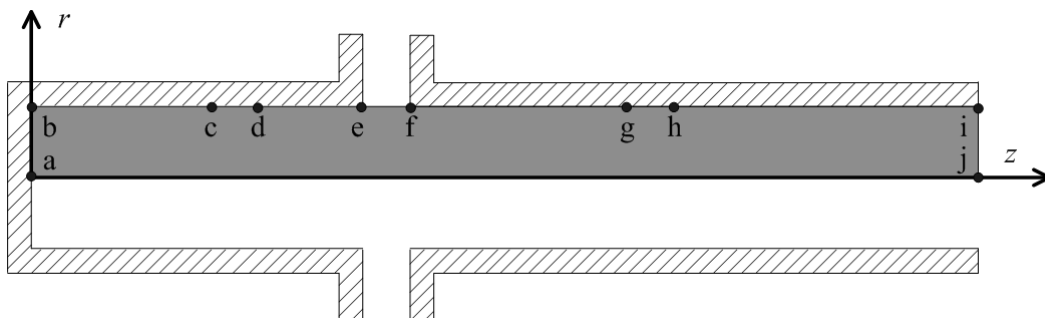


圖 27：水蒸氣電漿火炬流場計算空間示意圖

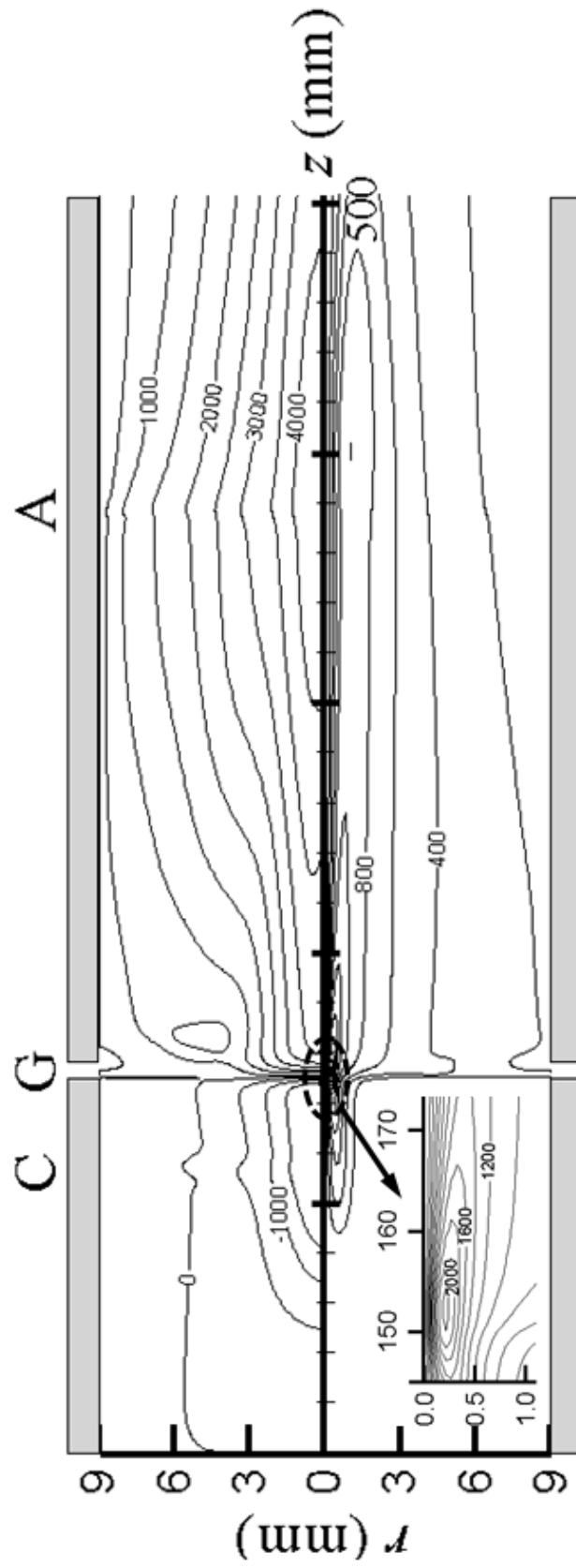


圖 28：水蒸氣電漿火炬流場速度分佈圖

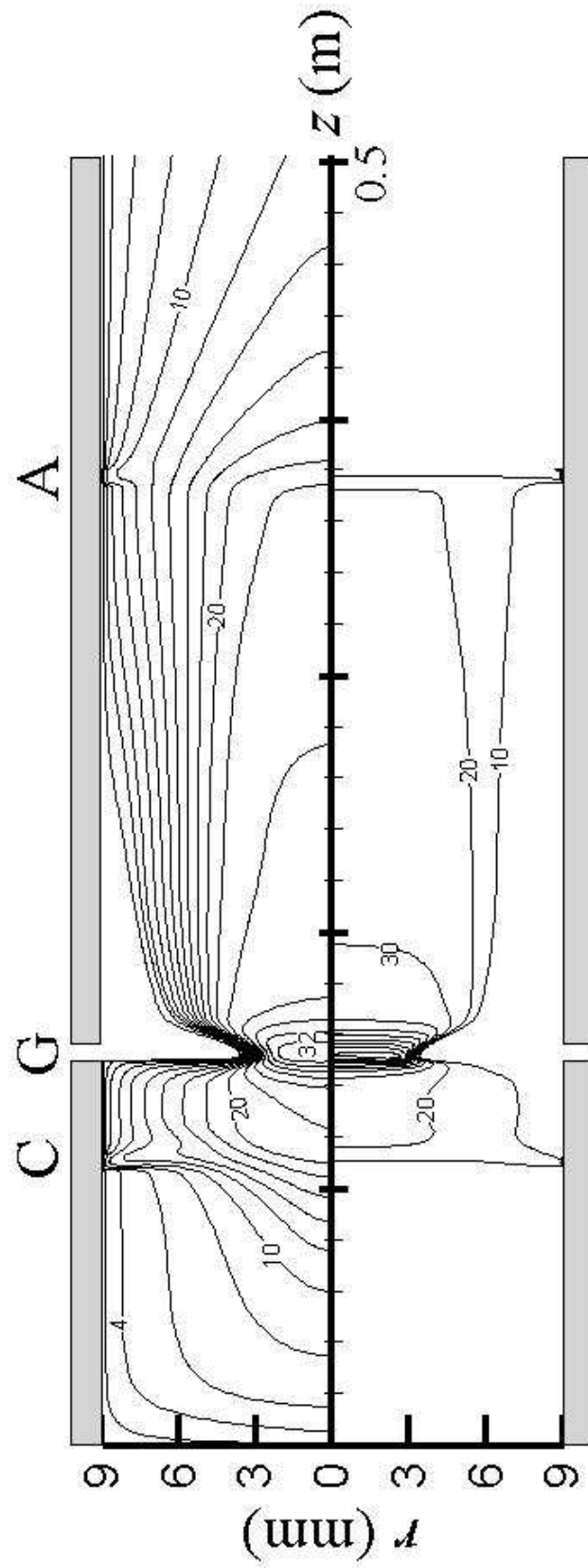


圖 29：水蒸氣電漿火炬流場溫度與電流密度分佈圖

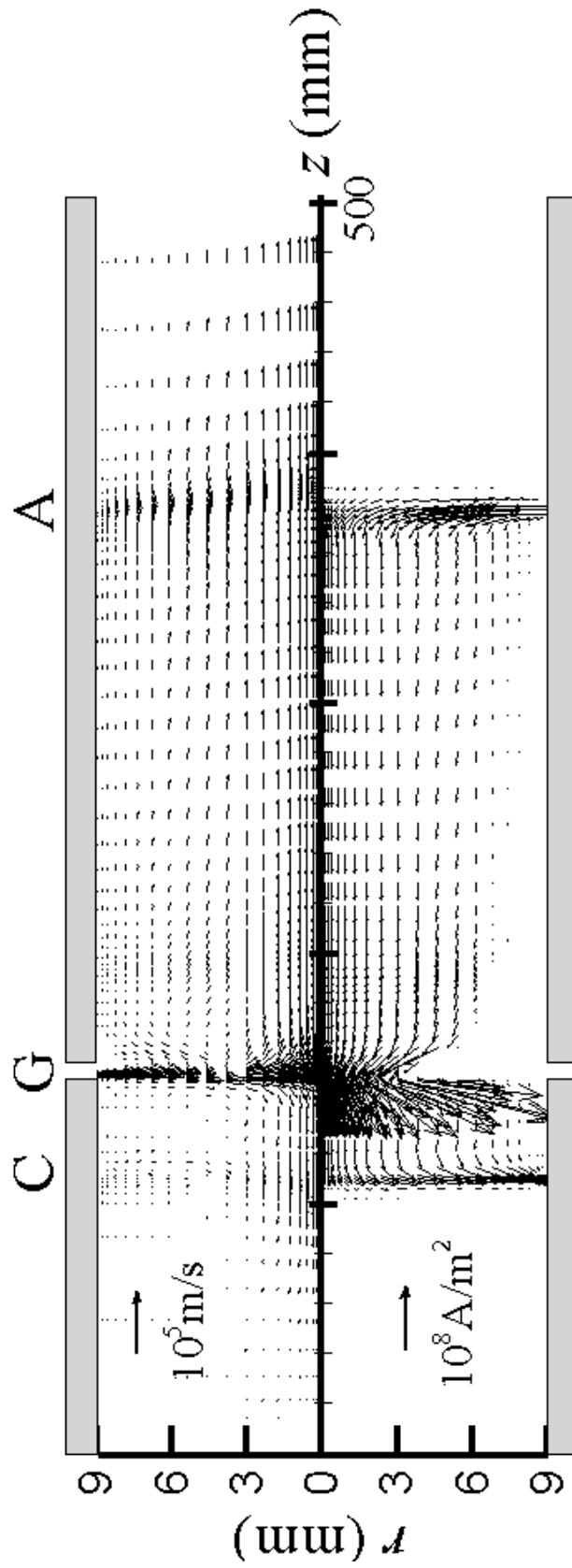


圖 30：水蒸氣電漿火炬流場速度與電流密度向量分佈圖



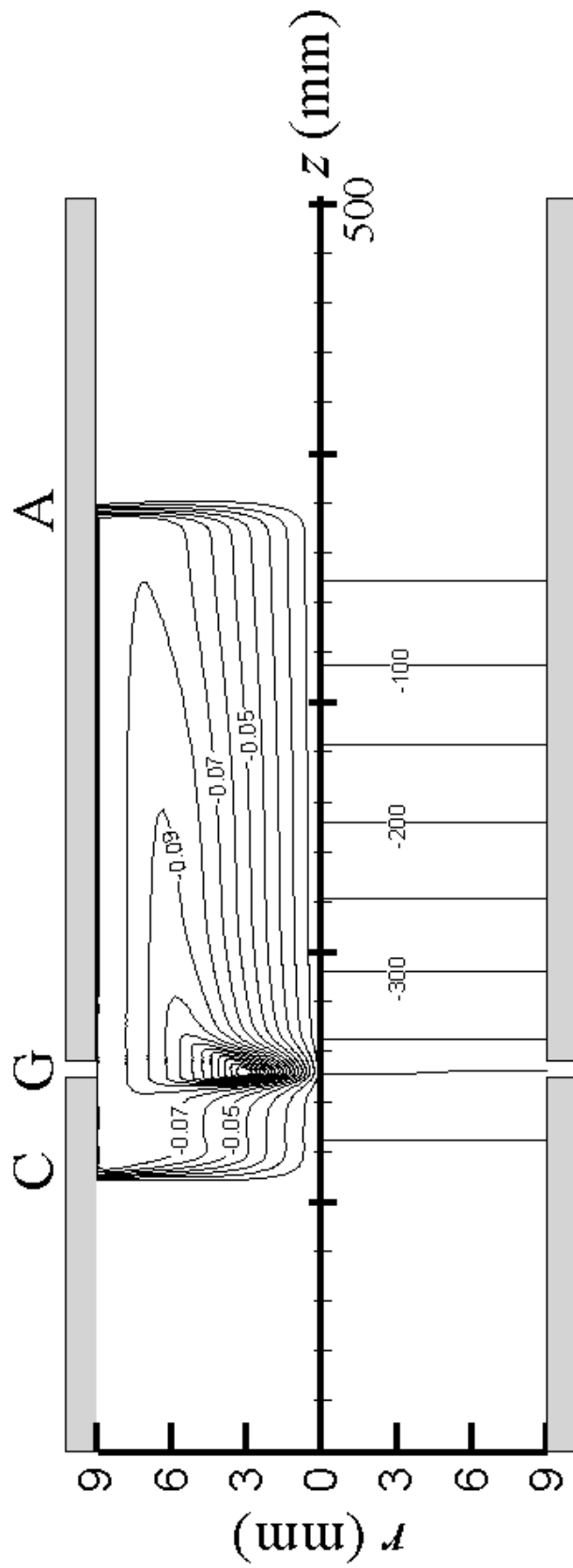


圖 31：水蒸氣電漿火炬流場誘導磁場與電壓分佈圖

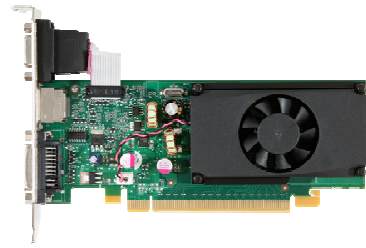
### 三、GPU 計算平台效能分析

為了進行 GPU 計算平台效能分析，本研究將先前研究成果[24]的平行化程式原始碼(使用 MPI 程式庫且符合 Fortran 77 語法)修改為序列版本(符合 Fortran 95 語法)，然後經由 HMPP 編譯器將該流場計算程式轉譯成 GPU 計算平台的開發語言。由於本研究使用 Nvidia 公司所開發之 GPU 計算平台(GeForce 210、GeForce 590、Tesla 1060 以及 Tesla 2050)進行計算效能分析(圖 32)，因此 HMPP 編譯器將本研究之流場計算程式先轉譯成 CUDA 原始碼，依此再進行下一步編譯成機械碼，使得計算程式得以在 GPU 與 CPU 上同時執行，如圖 33 所示。本研究所選擇的測試算例為使用單精度的三維網格流場計算，此時網格單元約為 40 萬。對於本研究所選擇的測試算例，不同硬體計算平台的計算效能如表 1 所示，計算效能比較基準為核研所近年安裝使用的平行電腦叢集單元的單一計算核心。本研究發現若直接將序列版本程式碼以 HMPP 編譯，GPU 計算平台僅能增加 70%的計算效能，若將原始求解聯立方程組的程式結構 SIPSOL 演算法[25]修改為較能符合 SIMT 架構的 Gauss-Seidel 演算法[26]，則平行效能可達到 8 左右；而對於以 MPI 程式庫使用 8 個計算核心的分散式平行計算而言，其效能僅能接近 6。MPI 平行計算之效率無法有效提升的主要原因在於，平行計算過程中計算結點間通訊所造成的時間延遲。當使用的計算結點越多，平行計算效能越差。因此

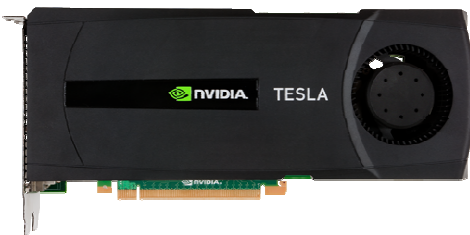
就性能價格比值而言，GPU 計算平台較傳統分散式平行計算平台更具優勢，因為前者可提供較高的效能但較低的設置成本。本研究發現 GPU 計算平台具有高平行化效率的發展潛力。本研究完成流場計算程式於 GPU 計算平台的移植工作，並進行分散式與共享式平行計算效能的比較，獲得 GPU 計算平台具有高平行化效率發展潛力的結論。



Tesla C1060



GeForce 210



Tesla C2050



GeForce 590

圖 32：GPU 計算平台[20]

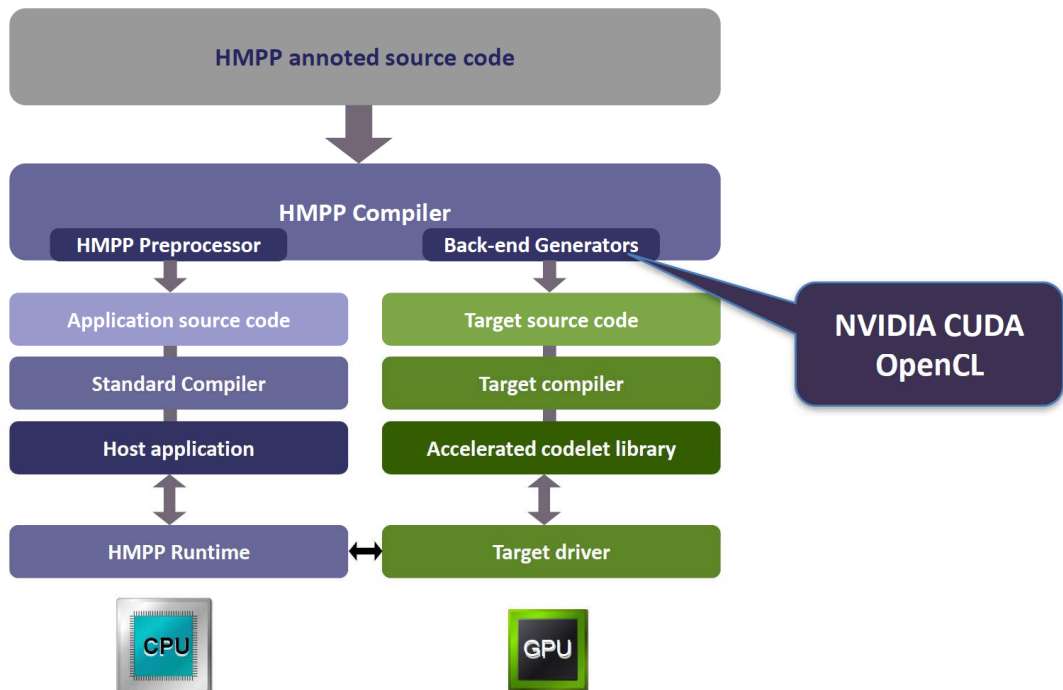


圖 33：HMPP 編譯器之執行流程圖[21]

Mfg.	CPU	Model	Clock Rate (Hz)	Core/Thread	Equation Solver	Complier	Speedup
AMD	Opetron	2220	2.80G	C1	SIPSOL	F95	1.00
Intel	Xeon	E5506	2.13G	C1	GAUSS SEIDEL	F95	1.13
Intel	Xeon	X5450	3.00G	C1	SIPSOL	F95	1.26
Nvidia	Tesla	C1060	1.30G	T240	SIPSOL	HMPP	1.69
Intel	Xeon	E5506	2.13G	C1	SIPSOL	F95	1.75
Nvidia	GeForce	210	1.40G	T16	GAUSS SEIDEL	HMPP	1.84
Intel	Xeon	X5550	2.67G	C1	SIPSOL	F95	2.24
Intel	Xeon	E5650	2.67G	C1	SIPSOL	F95	2.41
AMD	Opetron	2220	2.80G	C8(MPI)	SIPSOL	F95	5.80
Nvidia	GeForce	590	1.22G	T512	GAUSS SEIDEL	HMPP	7.32
Nvidia	Tesla	C1060	1.30G	T240	GAUSS SEIDEL	HMPP	8.15
Nvidia	Tesla	C2050	1.15G	T448	GAUSS SEIDEL	HMPP	8.50

(Single Precision, 3D Computation, Cell No.=0.4M)

表 1：不同平行計算平台計算效能比較表

#### 肆、參考文獻

1. 曾錦清，「電漿岩化技術之發展與應用」，電漿處理在環境工程之應用技術研討會，台北，2004年7月13—14。
2. Pfender E 1995 Plasma Chem. Plasma Process. 19 1
3. Fauchais P and Vardelle A 2000 Plasma Phys. Control Fusion 42 365
4. Scott D A, Kovitya P and Haddad G N 1989 J. Appl. Phys. 66 232
5. Stuart P R, Munz R J and Gauvin 1984 Plasma Chem. Plasma Process. 4 4 297
6. Kim, S W, Park H S and Kim H J 2003 Vacuum 70 59
7. Nishikawa H, Ibe M, Tanaka M, Ushio M, Takemoto T, Tanaka K, Tanahashi N and Ito T 2004 Vacuum 73 589
8. Nishikawa H, Ibe M, Tanaka M, Takemoto T and Ushio M 2006 80 1311
9. Park H S, Kim C G and Kim S J 2006 J. Ind. Eng. Chem. 12 2 216
10. Chau S W, Lu S Y and Wang P J 2011 Comp. Phys. Comm. 182 152
11. 趙修武、陳孝輝、廖文琳，「水蒸氣電漿化學動力反應模擬計算」，中國機械工程學會第二十七屆全國學術研討會，台北，2010年12月10—11日。
12. Křenek P and Nenicka V 1983 Acta Technica CSAV 28 5 549
13. Chau S W and Hsu K L 2011 Comp. & Fluids 45 109
14. Quinn M J 2003 Parallel Programming McGraw-Hill
15. <http://www.caps-entreprise.com>
16. <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/>
17. Hirschfelder O J and Curtiss 1963 C F Molecular Theory of Gases and Liquids John Willey
18. Svehla R A 1961 NASA Tech. Report 132
19. 張舒、褚艷利、趙開勇、張鈺勃，2009，GPU 高性能運算之 CUDA，

中國水利水電出版社。

20. <http://www.nvidia.com>
21. <http://www.caps-entreprise.com>
22. Křenek P 2008 Plasma Chem. Plasma Process. 28 107
23. Aubreton J, Elchinger M F and Vinson J M 2009 Plasma Chem. Plasma Process. 29 149
24. 趙修武、呂紹陽，2009，「電極熔蝕與三維暫態電漿火炬內部流場研究(II)」，核能所專題研究報告。
25. Stone H L 1968 SIAM J. of Num. Analysis 5 530
26. Patel V A 1994 Numerical Analysis Saunders College Publishing