

doi:10.3969/j.issn.2095-0411.2021.06.008

一种描述颗粒沉积现象的 Monte Carlo 算法

刘红梅^{1,2,3}, 蒋 威¹, 刘文明^{1,2}, 刘雪东^{1,2}

(1. 常州大学 机械与轨道交通学院, 江苏 常州 213164; 2. 江苏省绿色过程装备重点实验室(常州大学), 江苏 常州 213164; 3. 江苏梅兰化工有限公司, 江苏 泰州 225300)

摘要:为了提高 Monte Carlo 算法在求解颗粒群平衡方程时的计算精度和效率, 发展了一种基于异权值 Monte Carlo(DWMC)算法的快速 Monte Carlo(F-DWMC)算法, 该算法在处理颗粒沉积事件时采用确定性方法, 能够更加快速准确地求解颗粒的沉积行为。文章选定了两种存在理论分析解的工况(分别考虑颗粒重力沉积和布朗扩散沉积行为)对 F-DWMC 算法进行了验证, 获得了多分散颗粒物系统的颗粒尺寸分布函数曲线, 计算结果与理论分析解吻合较好, 并且与 DWMC 算法相比, F-DWMC 算法具有更高的计算精度和效率。

关键词: Monte Carlo 算法; 颗粒群平衡方程; 重力沉积; 布朗扩散沉积

中图分类号: X 513

文献标志码: A

文章编号: 2095-0411(2021)06-0051-07

A Monte Carlo Method for Particle Deposition Process

LIU Hongmei^{1,2,3}, JIANG Wei¹, LIU Wenming^{1,2}, LIU Xuedong^{1,2}

(1. School of Mechanical Engineering and Rail Transit, Changzhou University, Changzhou 213164, China; 2. Jiangsu Key Laboratory of Green Process Equipment, Changzhou University, Changzhou 213164, China; 3. Jiangsu Meilan Chemical Co., Ltd., Taizhou 225300, China)

Abstract: In order to improve the computational accuracy and efficiency of Monte Carlo method in solving the particle population balance equation, a fast Monte Carlo (F-DWMC) method based on the differentially weighted Monte Carlo (DWMC) method was proposed. The deposition event was solved by a deterministic method which would be faster and more precise. Two cases with analytical solutions were used to verify this F-DWMC method, where gravitation-dominant deposition and diffusion-dominant deposition were considered, respectively. The simulation results of F-DWMC method agree well with the analytical solutions with small relative errors. Furthermore, the F-DWMC method also exhibits higher computational accuracy and efficiency than the DWMC method for solving particle depo-

收稿日期: 2021-06-04。

基金项目: 江苏省自然科学基金资助项目(BK20210854); 江苏省高校自然科学基金资助项目(20KJB470009)。

作者简介: 刘红梅(1988—), 女, 河北衡水人, 博士, 讲师。E-mail: liuhm@cczu.edu.cn

引用本文: 刘红梅, 蒋威, 刘文明, 等. 一种描述颗粒沉积现象的 Monte Carlo 算法[J]. 常州大学学报(自然科学版), 2021, 33(6): 51-57.

sition dynamics.

Key words: Monte Carlo method; population balance equation; gravitation-dominant deposition; diffusion-dominant deposition

可吸入颗粒物是中国大部分城市空气污染的罪魁祸首,给人类健康带来严重威胁,是当今社会亟待解决的问题之一,因此有必要对颗粒物的演化机理进行研究^[1-2]。影响颗粒物的尺寸分布的动力学机理有很多因素,包括成核、凝并、生长、沉积等动力学过程。其中沉积过程广泛存在于大气污染物颗粒的自然沉降、气溶胶的脱除等自然现象以及纳米材料制备、工厂的灰飞或烟气的迁移脱除过程等工业应用中。沉积过程的发生会使颗粒物的尺寸分布函数发生变化,进而影响颗粒物的物理化学性质,而且在不同环境条件下,沉积过程的主要作用机理会发生变化,因此对颗粒物的沉积行为展开研究至关重要^[3-4]。

目前主要是通过求解颗粒群平衡方程(PBE)来模拟气溶胶颗粒的动力学演变过程,PBE 是一个典型的部分微分积分方程,具有非线性、非均匀、非稳定的特点^[5]。常见的求解方法主要有分区法^[6]、矩方法^[7]和蒙特卡洛(Monte Carlo,MC)法^[8]。MC 法在求解复杂的多维多分散颗粒群体时具有算法简单容易实现的优点,同时能够获得颗粒的轨道经历效应,因此 MC 法越来越受到人们的欢迎。由于 MC 法用虚拟颗粒模拟真实颗粒并且追踪每个颗粒的运动信息,其缺点是无法兼顾计算精度和计算代价。为了解决这一问题,学者们提出了“加权虚拟颗粒”的概念^[9-11]——每个虚拟颗粒可以代表一定数目的具有相同物理性质的真实颗粒,使得 MC 法的计算消耗降低了很多。ZHAO 等^[12-14]引入了子系统概念,提出了一种异权值蒙特卡洛(Differentially Weighted Monte Carlo,DWMC)算法。DWMC 算法在单组分和双组分颗粒系统中均得到了验证,有较高的精确性和实用性。

文章以 DWMC 算法为基础,发展一种新的 Monte Carlo 算法,将其应用于考虑颗粒沉积行为的颗粒动力学平衡方程的求解,提高其计算精度和效率,并将结果与理论分析解进行对比,对算法进行验证,获得多分散颗粒物系统的总数密度、颗粒的几何平均尺寸及颗粒尺寸分布函数随时间的演变过程。

1 描述颗粒沉积现象的快速 Monte Carlo 算法

1.1 考虑沉积事件的颗粒群平衡方程

描述颗粒沉积现象的颗粒群平衡方程(PBE)为^[15]

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = -R(v,t)n(v,t) \quad (1)$$

式中: $\frac{\partial n(v,t)}{\partial t}$ 表示体积为 v 的颗粒数密度随时间的变化; $-R(v,t)n(v,t)$ 表示沉积事件的发生对颗粒数密度时间变化率的影响。 $R(v)$ 表示体积为 v 的颗粒的沉积核,沉积核可以描述颗粒沉积的各种机理,包括重力沉降、布朗扩散、热泳迁移、静电作用等^[14]。文中主要考虑重力沉降和布朗扩散的影响。

在 DWMC 算法中,每个虚拟颗粒代表一定数目的实际颗粒,即每个虚拟颗粒 i 被定义一个数目权值 w_i ,其定义为^[14]

$$w_i = N_r / N_s \quad (2)$$

式中: N_r 为真实颗粒的数目; N_s 为虚拟颗粒的数目。

1.2 时间步长的选择

文中所采用的 Monte Carlo 算法是基于时间驱动的,为了保证在一个时间步长内,任何虚拟颗粒最

多只可能发生一次沉积事件,时间步长 Δt 的选择至关重要。

沉积事件的特征时间尺度为^[14]

$$\Delta t_{\text{dep}} = \min | \forall_i (1/R_i) \quad (3)$$

式中 R_i 为虚拟颗粒 i 的沉积核。

为了保证在每一个时间步长内任意一个虚拟颗粒最多只能发生一次沉积事件,所选择的时间步长必须小于等于沉积事件的特征时间尺度,为了提高数值计算精度,时间步长设置为

$$\Delta t = \alpha \times \Delta t_{\text{dep}} \quad (4)$$

式中 α 为乘积因子,一般取值为 $\alpha \leq 0.01$ 。

1.3 沉积事件的处理

1.3.1 DWMC 算法对沉积事件的处理过程

DWMC 算法在处理沉积事件时采用的是随机方法^[14],首先判断虚拟颗粒 i 是否发生沉积事件,判断方法为

$$\begin{cases} r_1 \leq P_i & i \text{ 沉积} \\ r_1 > P_i & i \text{ 不沉积} \end{cases} \quad (5)$$

式中: P_i 为该颗粒发生沉积的概率(见式(8)); r_1 为位于 $(0,1)$ 且满足均匀分布的随机数。

如果虚拟颗粒 i 发生沉积后,则再次通过一个随机过程选取一个虚拟颗粒 j ,并且将其分裂为 2 个虚拟颗粒,新生成的 2 个虚拟颗粒分别代替虚拟颗粒 i 和 j 。处理方法为^[14]:

$$\begin{aligned} w'_i &= w_j/2; \quad w'_j = w_j/2 \\ v'_i &= v_j; \quad v'_j = v_j \end{aligned} \quad (6)$$

式中: w'_i, v'_i 分别为沉积事件发生后虚拟颗粒 i 的数目权值和体积; w'_j, v'_j 分别为沉积事件发生后虚拟颗粒 j 的数目权值和体积。

1.3.2 F-DWMC 算法对沉积事件的处理过程

在处理沉积事件时,与 DWMC 算法不同的是,F-DWMC 算法采用的是确定性方法,由于每个虚拟颗粒代表 w_i 个真实颗粒,因此当虚拟颗粒 i 在 Δt 内发生沉积事件的概率为 $P_{\text{dep},i}$ 时,F-DWMC 算法不采用随机方法处理沉积事件,而是认为虚拟颗粒 i 内部有比例为 $P_{\text{dep},i}$ 的真实颗粒发生了沉积,因此在 i 颗粒经历沉积事件后,其数目权值发生了改变, w'_i 的值为

$$w'_i = w_i \times (1 - P_{\text{dep},i}) \quad (7)$$

式中颗粒 i 的沉积概率 $P_{\text{dep},i}$ 的表达式为^[16]

$$P_{\text{dep},i} = 1 - \exp(-R_i \Delta t) \quad (8)$$

式中 R_i 为虚拟颗粒 i 的沉积核。

2 算法验证工况描述

分别通过两种工况来验证 F-DWMC 算法,在选定两种工况的条件下,颗粒尺寸分布函数存在理论分析解,将利用理论分析解来验证 F-DWMC 算法,并且利用 DWMC 算法进行对比,文章分别对两种工况做详细介绍。

2.1 重力沉积工况

颗粒初始尺寸分布函数满足对数正态分布,分布函数为

$$n(r, 0) = \frac{1}{r} \frac{N_0}{\sqrt{2\pi} \ln \sigma_0} \exp \left[-\frac{\ln^2(r/r_{g_0})}{2 \ln^2 \sigma_0} \right] \quad (9)$$

式中: N_0 为初始颗粒数密度, 取 10^6 个/ m^3 ; r_{g_0} 为颗粒的初始几何平均半径, 取 $3 \mu\text{m}$; σ_0 为初始几何标准方差, 取 1.5。

颗粒的重力沉积核表达式为

$$R_g(v, t) = Br^2 \quad (10)$$

式中 $B = 2\rho g / (9\mu h)$, 其中 $\rho = 2000 \text{ kg}/\text{m}^3$, $g = 9.782 \text{ m}/\text{s}^2$, $\mu = 3.14 \times 10^{-5} \text{ kg}/(\text{m} \cdot \text{s})$, $h = 2.5 \text{ m}$ 。

在此工况下, 颗粒的总数密度及几何平均半径的理论分析解为^[15]:

$$\frac{N}{N_0} = \exp \left[-\frac{\sqrt{1 + 2Br_{g_0}^2 y_0 (y_0^2 - 1)t} - 1}{y_0^2 - 1} \right] \quad (11)$$

$$\frac{r_g}{r_{g_0}} = \sqrt{\frac{y_0 (y^2 - 1)}{y (y_0^2 - 1)}} \quad (12)$$

式中: $y = \exp(2 \ln^2 \sigma_g)$; $y^2 - 1 = \frac{y_0^2 - 1}{\sqrt{1 + 2Br_{g_0}^2 y_0 (y_0^2 - 1)t}}$ 。

2.2 布朗扩散沉积工况

颗粒初始尺寸分布函数与重力沉积工况相同, 满足式(9), 初始颗粒数密度 $N_0 = 10^6$ 个/ m^3 , 颗粒的初始几何平均半径 $r_{g_0} = 0.01 \mu\text{m}$, 初始几何标准方差 $\sigma_0 = 1.5$ 。

颗粒的布朗扩散沉积核表达式为

$$R_d(v, t) = Ar^{-2(n-1)/n} \quad (13)$$

其中扩散沉积系数 A 的表达式为

$$A = \left(\frac{1.7\lambda k_B T}{6\pi\mu} \right)^{(n-1)/n} \left[\frac{nS \sin(\pi/n) \sqrt[n]{k_e L_2^{2-n}}}{\pi V} \right] \quad (14)$$

式中: λ 为介质分子的平均自由程, 取 $2 \times 10^{-8} \text{ m}$; k_B 为玻尔兹曼常数, 取 $1.38065 \times 10^{-8} \text{ J} \cdot \text{K}$; k_e 为湍流扩散系数, 取 36 s^{-1} ; $T = 433.15 \text{ K}$; $L_2 = L/\sqrt{Re}$, 其中 $L = 1 \text{ m}$, $Re = 3000$; V 为计算域体积, 文中采用的计算域长 \times 宽 \times 高为 $3 \text{ m} \times 5 \text{ m} \times 2.5 \text{ m}$ 。

在此工况下, 颗粒的总数密度及几何平均半径的理论分析解为^[15]

$$\frac{N}{N_0} = \exp \left[-\frac{\sqrt{1 + 2As_0^{-1} z_0 (z_0^2 - 1)t} - 1}{z_0^2 - 1} \right] \quad (15)$$

$$\frac{r_g}{r_{g_0}} = \left(\frac{z(z_0^2 - 1)}{z_0(z^2 - 1)} \right)^{\frac{n}{2(n-1)}} \quad (16)$$

式中: $z = \exp \left(\frac{2(n-1)^2}{n^2} \ln^2 \sigma_g \right)$; $z^2 - 1 = \frac{z_0^2 - 1}{\sqrt{1 + 2As_0^{-1} z_0 (z_0^2 - 1)t}}$ 。

在以上两种工况中, 初始虚拟颗粒数为 3000, 并将实际颗粒群分为 200 类颗粒, 为了验证 F-DWMC 算法的计算精度和效率, DWMC 算法的计算结果也同时给出以作对比分析。

3 结果讨论

3.1 粗大颗粒的重力沉积

重力沉积工况下选取的演变时间为 20000 s, 由 F-DWMC 算法计算得出的颗粒总数密度及几何平

均半径随时间的演变过程、理论分析解、DWMC 算法的计算结果对比,如图 1 所示。从图 1 中可以看出,颗粒的总数密度随着时间的增长而逐渐降低,颗粒的几何平均半径随着时间的增长而减小。这是因为随着沉积事件的发生,沉积的颗粒数目越来越多,系统中存在的颗粒数密度会逐渐降低。由于尺寸越大的颗粒重力也越大,因此受重力沉积影响也越大,沉积颗粒中粗大颗粒占的比例较大,所以系统中存在颗粒的几何平均半径逐渐减小。

F-DWMC 算法的计算结果与理论分析解的结果相吻合,而且从图 1 中可以看出 F-DWMC 算法的计算结果和 DWMC 算法相比更靠近理论分析解。

不同时刻($t = 700, 2\,000, 5\,000$ s)的颗粒尺寸分布曲线,如图 2 所示。由图 2 可以看出 F-DWMC 算法计算得出的颗粒尺寸分布函数曲线与理论分析解的结果吻合较好。随着时间的推移,颗粒的尺寸分布曲线逐渐变窄变矮,这是因为随着沉积事件的发生,颗粒在不同粒径处的数密度均逐渐减小,而且曲线峰值处的颗粒半径逐渐减小,即曲线逐渐向粒径更小的方向推移,这是因为较大的颗粒受重力沉积影响较大,数密度减小的速度更快。反之,较小的颗粒受重力沉积影响较小,数密度变化速率较小,因此造成图中曲线的变化趋势。图 2 同时给出了 DWMC 算法计算得出的颗粒尺寸分布曲线。由图 2 可知, DWMC 算法使用随机概率的方法处理沉积事件,虽然计算结果也与理论解析解相吻合,但是曲线的波动性比较大。F-DWMC 算法计算得出的颗粒尺寸分布曲线则较为光滑,很好地解决了曲线波动性大的问题。

3.2 细小颗粒的布朗扩散沉积

布朗扩散沉积工况下选取的演变时间为 70 000 s,颗粒的总数密度及几何平均半径随时间的演变过程、理论分析解、DWMC 的计算结果

对比,如图 3 所示。从图 3 中可以看出,在此工况的条件下,颗粒的总数密度随着时间的增长而逐渐降低,这是因为沉积事件的发生会导致颗粒的数密度减少;与重力沉积工况不同的是,颗粒的几何平均半径随着时间的增长而逐渐增大,这是因为尺寸越小的颗粒受布朗扩散沉积的影响越大,沉积颗粒中细小颗粒占的比例较大,因此系统中存在颗粒的几何平均半径逐渐增大。

图 4 给出了不同时刻($t = 4\,000, 10\,000, 23\,000$ s)的颗粒尺寸分布曲线。随着时间的推移,颗粒的尺寸分布曲线逐渐变窄变矮,而且曲线峰值处的颗粒半径逐渐增大,即曲线逐渐向粒径更大的方向推移,这是因为较小的颗粒受扩散沉积影响较大,数密度减小的速度更快。反之,较大的颗粒受扩散沉积影响较小,数密度变化速率较小,因此造成图中曲线的变化趋势。

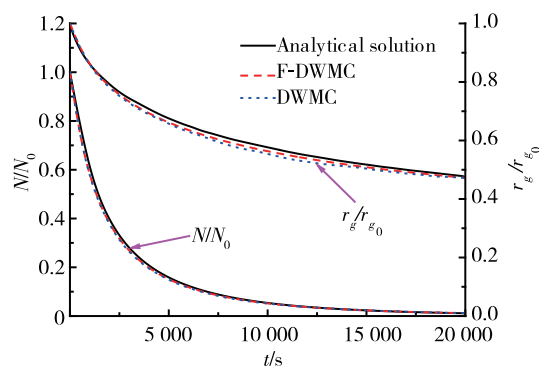


图 1 重力沉积工况条件下颗粒数密度与几何平均半径随时间的演变规律

Fig.1 Time evolution of particle number density and particle geometric mean radius for the gravitational-dominant case

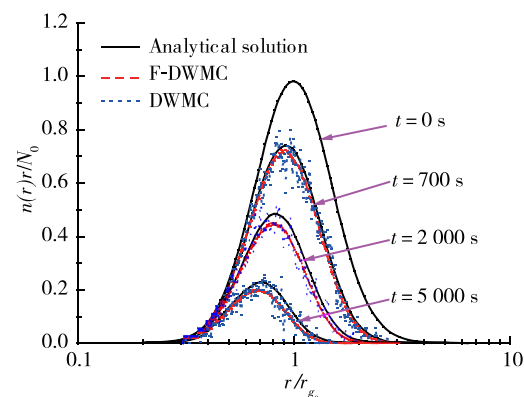


图 2 重力沉积工况条件下颗粒尺寸分布函数随时间的演变规律

Fig.2 Time evolution of particle size distributions for the gravitational-dominant case

从图 3 和图 4 中可以看出,F-DWMC 算法和 DWMC 算法计算得出的结果均与理论分析解相吻合,但是同重力沉积工况的结果类似,DWMC 算法得出的几何平均半径演变曲线和颗粒尺寸分布曲线的波动性比较大,F-DWMC 算法计算得出的颗粒尺寸分布曲线则较为光滑。

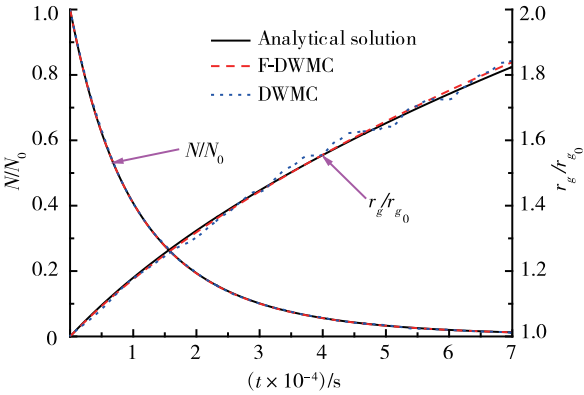


图 3 布朗扩散沉积工况条件下颗粒数密度与几何平均半径随时间的演变规律

Fig.3 Time evolution of particle number density and particle geometric mean radius for the diffusion-dominant case

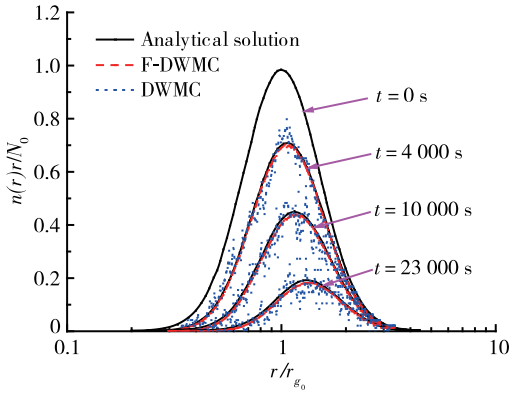


图 4 布朗扩散沉积工况条件下颗粒尺寸分布函数随时间的演变规律

Fig.4 Time evolution of particle size distributions for the diffusion-dominant case

3.3 计算精度和效率分析

表 1 给出了两种工况下,F-DWMC 算法和 DWMC 算法计算得出的最大相对误差与所需的计算时间(计算环境为: Intel i7-8700, 32G, Visual Studio 2019)。

其中相对误差的定义为

$$\epsilon = \left| \frac{A - A_0}{A_0} \right| \times 100\% \tag{17}$$

式中: A 为 F-DWMC 算法或 DWMC 算法计算得出的值; A₀ 为理论分析解的结果。

无量纲计算时间的定义为

$$\tau = \frac{t}{t_0} \tag{18}$$

式中 t₀ 为 F-DWMC 算法在重力沉积工况下的计算时间, 为 1.1 s。

表 1 两种工况下两种计算方法的计算精度和时间对比

Table 1 Comparison of computational relative error and normalized computation time derived from two cases using the F-DWMC and DWMC methods

算法	重力沉积工况			布朗扩散沉积工况		
	$\epsilon_{N,max}/\%$	$\epsilon_{r,max}/\%$	τ	$\epsilon_{N,max}/\%$	$\epsilon_{r,max}/\%$	τ
F-DWMC	5.8	5	1	0.9	0.4	9.7
DWMC	6.9	5.5	2.5	2	1.7	16.2

从表 1 中可以看出,在两种工况的条件下,F-DWMC 算法计算得出的基于颗粒数密度和几何平均半径的相对误差均比 DWMC 算法小,其计算结果更接近理论分析解。在重力沉积工况的条件下,DWMC 算法的计算时间是 F-DWMC 算法的 2.5 倍,在布朗扩散沉积工况的条件下,DWMC 算法的计

算时间是 F-DWMC 算法的 1.7 倍,因此 F-DWMC 算法计算速度更快。

因此,在描述颗粒重力沉积或布朗扩散沉积事件时,与 DWMC 算法相比,F-DWMC 算法具有更高的计算精度和效率。

4 结 论

基于异权值 Monte Carlo(DWMC)算法,发展了一种快速 DWMC(F-DWMC)算法,用于求解考虑颗粒沉积作用下的多分散颗粒群平衡方程。该算法能够高效率、高精度地模拟颗粒的重力沉积与布朗扩散沉积过程,计算结果与相应的理论分析解吻合较好。与 DWMC 算法相比,F-DWMC 算法更加精确和高效,可以作为今后进行颗粒动力学的数值分析或工程应用计算的一种手段。

参考文献:

- [1]李福生,徐新喜,孙栋,等.气溶胶颗粒在人体上呼吸道模型内沉积的实验研究[J].医用生物力学,2013,28(2): 135-141.
- [2]XU Z M, SUN A D, HAN Z M, et al. Improvement of particle deposition model using random function method[J]. Building and Environment, 2019, 158: 192-204.
- [3]LI Y, GU W G, WANG D Z, et al. Direct numerical simulation of polydisperse aerosol particles deposition in low reynolds number turbulent flow[J]. Annals of Nuclear Energy, 2018, 121: 223-231.
- [4]李金波,王沛丽,程林.一种新型受热面飞灰颗粒的沉积特性[J].化工学报,2016,67(9): 3598-3606.
- [5]FRIEDLANDER S. Smoke, dust and haze: fundamentals of aerosol behaviour[M]. New York: Oxford University Press, 1977.
- [6]SHANG X P, WAN M P, NG B F, et al. A CFD-sectional algorithm for population balance equation coupled with multi-dimensional flow dynamics[J]. Powder Technology, 2020, 362: 111-125.
- [7]YU M Z, LIU Y Y, JIN G D, et al. A new analytical solution for agglomerate growth undergoing Brownian coagulation[J]. Applied Mathematical Modelling, 2016, 40(9/10): 5497-5509.
- [8]LIU H M, CHAN T L. Differentially weighted operator splitting Monte Carlo method for simulating complex aerosol dynamic processes[J]. Particuology, 2018, 36: 114-126.
- [9]赵海波,郑楚光.凝并和成核机理下颗粒尺度分布的 Monte Carlo 求解[J].高等学校化学学报,2005,26(11): 2086-2089.
- [10]DEVILLE R E L, RIEMER N, WEST M. Weighted Flow Algorithms (WFA) for stochastic particle coagulation[J]. Journal of Computational Physics, 2011, 230(23): 8427-8451.
- [11]LIU H M, CHAN T L. Two-component aerosol dynamic simulation using differentially weighted operator splitting Monte Carlo method[J]. Applied Mathematical Modelling, 2018, 62: 237-253.
- [12]ZHAO H B, KRUIS F E, ZHENG C G. A differentially weighted Monte Carlo method for two-component coagulation[J]. Journal of Computational Physics, 2010, 229(19): 6931-6945.
- [13]ZHAO H B, ZHENG C G, XU M H. Multi-Monte Carlo method for particle coagulation: description and validation [J]. Applied Mathematics and Computation, 2005, 167(2): 1383-1399.
- [14]赵海波,郑楚光.描述颗粒沉积动力学演变过程的一种随机算法[J].空气动力学学报,2006,24(2): 141-146.
- [15]PARK S H, LEE K W. Analytical solution to change in size distribution of polydisperse particles in closed chamber due to diffusion and sedimentation[J]. Atmospheric Environment, 2002, 36(35): 5459-5467.
- [16]赵海波,郑楚光.同时发生的颗粒凝并和沉积现象的 Monte Carlo 模拟[J].中国科学 E 辑,2006,36(3): 270-284.

(责任编辑:谭晓荷)