

# 描述颗粒凝并动力学的事件驱动常体积法

赵海波\*, 郑楚光

华中科技大学煤燃烧国家重点实验室, 武汉 430074

\* E-mail: klinsmannzhhb@163.com

收稿日期: 2007-10-29; 接受日期: 2008-02-17

国家重点基础研究发展计划(“973 计划”)(批准号: 2006CB705800)和国家自然科学基金(批准号: 20606015)资助项目

**摘要** 构建了“异数目权值虚拟颗粒群策略”和“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”, 在事件驱动 MC 的框架下描述数目权值不等的虚拟颗粒之间的凝并事件, 并发展“常数目方案”和“阶梯式常数目方案”来保持虚拟颗粒数目在凝并动力学过程中保持在一定范围之内, 且保持计算区域体积不变. 该方法被命名为事件驱动常体积(EDCV)法. 通过与多种主流 MC 的定量比较, 证明 EDCV 法达到甚至超过了其他随机方法所表现的计算精度和计算效率.

## 关键词

颗粒群平衡模拟  
随机算法  
凝并  
颗粒尺度分布

颗粒群平衡模拟(population balance modeling, PBM)研究的是离散系统的动力学演变过程, 可涉及的动力学事件包括离散单元(多相流中离散的固体颗粒、液滴或气泡等)之间的碰撞、凝并(或团聚)、(异相)冷凝/蒸发(或生长)、(均相)成核、沉积(或清除)、化学反应等. 颗粒尺度分布函数(particle size distribution function, PSDF)是研究离散颗粒系统动力学演变过程的一个关键, PBM关注的正是各种动力学事件主导下 PSDF 的动力学演变过程. 如果把离散系统视为空间各向同性的零维系统, 不注重多相湍流场细节信息的获取以及 PSDF 的空间扩散, 仅仅获取各种动力学事件主导下 PSDF 的时间演变过程, 则称其为零维 PBM; 而如果同时获取 PSDF 的时间和空间演变过程, 则称为多维颗粒群平衡模拟, 此时必须与多相湍流模型耦合起来.

PBM在燃烧、化学工程、气溶胶、纳米粉体、大气物理等领域得到广泛应用, 许多研究者倾注了大量的心血促使其得到了飞速发展. 从最近二十年来看, PBM 的主要工作集中在颗粒群平衡方程(PBE)的数值求解、描述动力学过程物理化学内涵的核模型的理论 and 试验研究、PBM在各种复杂离散系统中的应用<sup>[1]</sup>. 由于颗粒凝并事件(两颗颗粒碰撞而粘结在一起形成一颗新的尺度更大的颗粒)的重要性和普遍性, 它是 PBM 的焦点研究领域; 由于颗粒凝并事件涉及两颗或两颗以上的颗粒(本文及绝大部分文献均只考虑双颗粒凝并事件), 它又是 PBM 研究的难点之一, 其难点主要体现在考虑凝并事件时 PBE 具有部分积分微分特性. 基于颗粒稀疏

和分子混沌假设、描述 PSDF 时间演变过程的 PBE 如下所示(仅考虑凝并事件)<sup>[2]</sup>

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v-u,u,t) n(v-u,t) n(u,t) du - n(v,t) \int_0^\infty \beta(v,u,t) n(u,t) du, \quad (1)$$

其中,  $n(v, t)$  为颗粒尺度分布函数, 量纲为  $\text{m}^{-3} \cdot \text{m}^{-3}$ ,  $n(v, t)dv$  表示时刻  $t$ 、体积范围在  $v \sim v+dv$  内的颗粒在单位体积内的数目浓度.  $\beta(u, v, t)$  是时刻  $t$ 、两颗粒(尺度分别为  $u$  和  $v$ ) 的凝并核, 表示单位时间内两颗粒发生一次凝并事件的概率. 凝并核模型可以通过理论分析、微观或介观数值模拟、实验研究等得到, 目前已有较为成熟的一些凝并核模型, 包括各种布朗凝并核和湍流凝并核等<sup>[2]</sup>. 方程(1)右边第一项为生成项, 表示尺度为  $u (< v)$  的颗粒与尺度为  $(v-u)$  的颗粒凝并而生成尺度为  $v$  的新颗粒, 系数  $1/2$  是为了考虑一次凝并事件有两颗颗粒参与; 右边第二项为消亡项, 表示尺度为  $v$  的颗粒与其他任何尺度的颗粒发生凝并事件生成新的尺度更大的颗粒、并使得自身消亡. 值得注意的是, 颗粒碰撞事件并不会引起颗粒尺度分布函数的时间演变, 但是将导致颗粒尺度分布函数的空间演变, 所以零维 PBM 不考虑颗粒碰撞事件. 本文致力于零维 PBM 中颗粒凝并的描述.

直接在欧拉坐标体系下采用确定性方法(如矩方法、分区法等<sup>[3]</sup>)对方程(1)在高维相空间(多分散性离散颗粒群)进行积分微分存在数学模型复杂、离散误差等若干难点. 直接描述离散系统动力学演变过程而间接地求解 PBE 则成为一条重要途径. Monte Carlo(MC)方法有着天生的离散特性, 正好与所研究系统的离散本质(包括离散的颗粒和离散的动力学事件等)不谋而合. 作为一种拉氏体系的方法, 能得到颗粒轨道经历效应和历史效应, 从而能得到颗粒动力学演变过程的细节信息, 可方便处理多维、多组分、多分散性(宽筛分)颗粒群, 算法相对简单而易于编程实现. 以上优点使得 MC 方法成为一类重要的 PBE 数值方法.

总体而言, PBM 的 MC 算法可划分为如下几大类<sup>[3]</sup>: 时间驱动 MC 和事件驱动 MC(按照时间窗口的离散方案划分)、常数目法和常体积法(按照模拟颗粒数目和计算区域体积的保持方案划分). 时间驱动 MC<sup>[4]</sup>在实时设置的合理时间步长范围内, 基于各动力学事件解耦而相互独立的假设, 考虑所有颗粒可能发生的各种事件, 该时间窗口内任何颗粒最多发生一次某类型的事件(某颗粒允许同时发生不同类型事件). 事件驱动 MC<sup>[5]</sup>的思路则是: 首先依据事件的平均速率计算两次事件之间的时间间隔(或称为静止时间或等待时间), 然后依据事件的发生概率来选定等待时间之后可能发生的事件类型, 并实现该事件. 常体积法<sup>[5]</sup>中的计算区域体积在计算过程中保持不变, 但是其内模拟颗粒数目可能超出合理范围(数目过多则计算代价太大, 数目过少则计算精度太低). 常数目法<sup>[6]</sup>则通过收缩(颗粒数目浓度增大时)或者扩展(颗粒数目浓度减小时)计算区域来恢复其内模拟颗粒数目. 也有一些 MC<sup>[4,7,8]</sup>采用阶梯式恢复模拟颗粒数目的方法来调解模拟颗粒数目和计算区域体积的矛盾, 即当计算区域内模拟颗粒数目超出初始数目的一半或两倍时, 采用倍增或倍减计算区域体积的动作来恢复计算区域内模拟颗粒数目.

实际上, 目前已发表的 PBM 随机算法大都同时具有以上的几个特征. 如 Garcia 等人<sup>[5]</sup>发展的 MC 为事件驱动 MC 和常体积法, Liffman<sup>[4]</sup>发展的 MC 为时间驱动 MC 和(阶梯式)常体积法, Maisels 等人<sup>[7,8]</sup>发展的 MC 为事件驱动 MC 和(阶梯式)常体积法, Matsoukas 等人<sup>[6]</sup>发展的 MC 属于事件驱动 MC 和常数目法, 作者发展的多重 MC(MMC)<sup>[9]</sup>属于时间驱动 MC、常数目法

和常体积法.

本文作者等人<sup>[10]</sup>建立了 MC 算法对 PSDF 时间演变描述精度的定量评判方法, 详细比较了时间驱动直接模拟 MC(DSMC)<sup>[4]</sup>、阶梯式常体积法<sup>[8]</sup>、常数目法<sup>[6]</sup>和 MMC 算法<sup>[9]</sup>进行零维 PBM 时的计算精度和计算效率, 发现: 1) 事件驱动 MC 整体上比时间驱动 MC 具有更高的计算精度和计算效率; 2) 严格保持常数目和常体积是以算法计算精度和计算效率的降低为代价的; 3) 常体积特征有利于 MC 扩展以考虑 PSDF 的空间演变等. 然而, 目前已发表的几种事件驱动 MC 均存在若干缺陷, 如: 阶梯式常体积法和常数目法等均基于颗粒尺度分布空间各向同性和周期性边界条件等假设、从整体系统中取样一个“子系统”, 跟踪“子系统”内数目权值相等的模拟颗粒, 即实际上采用一种“等数目权值虚拟颗粒群策略”来初始化实际颗粒群并描述其动力学演变; 它们均以调整计算区域体积为代价来把模拟颗粒数目保持在一定范围内. 这些特征使得这些事件驱动 MC 难以考虑边界条件、不利于耦合多相湍流模型和网格划分技术等, 从而难以扩展以描述 PSDF 的空间演变(多维 PBM). 正是如此, 本文基于“异数目权值模拟颗粒群策略”发展了一种零维颗粒群平衡模拟的新随机方法, 用于描述 PSDF 的时间演变过程.

## 1 事件驱动常体积法的发展

### 1.1 异数目权值虚拟颗粒群策略

MMC 算法首次发展了“异数目权值虚拟颗粒群策略”<sup>[11,12]</sup>. 这种策略是从整体系统的角度出发、直接把实际颗粒群初始化为“异数目权值虚拟颗粒群”, 不需要其他附加假设. 它认为一类尺度相同或者相近的实际颗粒具备同样的动力学属性和行为, 这些实际颗粒由若干颗虚拟颗粒代表, 虚拟颗粒是这些实际颗粒的指示器. 虚拟颗粒的数目权值的物理意义是该颗虚拟颗粒所代表的实际颗粒的数目. 通过跟踪虚拟颗粒群的演变过程来描述计算区域内实际颗粒群的演变过程. 数目较少的虚拟颗粒群与数目较多的实际颗粒群在 PSDF 这个关键参数上具有相同的统计意义. 实际上, 同类的虚拟颗粒具有相同的数目权值, 但是不同类的虚拟颗粒间的数目权值不同, 且在动力学演变过程中, 调整虚拟颗粒数目权值和尺度信息来描述动力学事件的后果, 也便于常数目和常体积特征的保持. 产生异数目权值虚拟颗粒群的具体过程和示例可以参照文献<sup>[9,11,12]</sup>, 本文所要发展的新随机算法也基于该“异数目权值虚拟颗粒群策略”.

实际上, 普通 MC 方法所采用的“等数目权值模拟颗粒群策略”是“异数目权值模拟颗粒群策略”的一种特例, 后者的采用至少具有如下好处. 1) “等数目权值模拟颗粒群策略”的采用可能引入较大的离散误差; 在 MC 模拟开始之前均需要对实际颗粒群进行初始化、以产生模拟颗粒群. 无论哪种概念被采用, MC 算法都希望所跟踪的模拟颗粒群尽可能地继承实际颗粒群在颗粒尺度分布方面的所有细节信息. 对于初始单分散性颗粒群, “等数目权值模拟颗粒群策略”能够完全继承实际颗粒群尺度分布函数的细节信息. 然而当采用“等数目权值模拟颗粒群策略”来初始化多分散性颗粒群时, 可能会丢失实际颗粒群的颗粒尺度分布函数的细节信息, 因为它可能不足以分配一颗模拟颗粒来代表那些数目浓度较小的颗粒区间, 从而导致了颗粒尺度分布函数信息的丢失; 与此不同的是, 当采用“异数目权值模拟颗粒策略”时, 可以灵活地分配模拟颗粒的数目权值, 从而可以保留那些数目浓度较小的颗粒区间, 尽可能地复制实际颗

粒群的尺度分布曲线. 2) “等数目权值模拟颗粒群策略”的采用将可能恶化 MC 算法的统计精度; 这是因为当获取颗粒尺度分布函数时, 需要统计得到每个颗粒区间的数目浓度, 这个统计过程的精度与该区间内模拟颗粒数目的平方根成反比, 如果该颗粒区间内只有仅仅一颗或几颗模拟颗粒, 则统计误差会非常大, 这种情况在“等数目权值模拟颗粒群策略”中经常可以遇到. 而在“异数目权值模拟颗粒策略”中, 可以调整虚拟颗粒的数目权值使得每个颗粒区间均存在相当数量的虚拟颗粒, 从而尽可能减少统计误差、提高 MC 算法对颗粒尺度分布函数的描述精度. 3) “等数目权值模拟颗粒策略”的采用将限制 MC 算法的应用范围. 例如, 颗粒破碎过程可能产生具有不同数目、不同尺度的子颗粒, 这些子颗粒应该采用具有不同尺度、不同数目权值的模拟颗粒来代表; 成核过程也可能产生不同尺度、不同数目的核体颗粒, 这种情况采用“异数目权值虚拟颗粒群策略”可以较好解决.

### 1.2 事件驱动常体积法的流程

在以上“异数目权值模拟颗粒策略”主导下发展了一种新的 MC 方法, 它基于事件驱动 MC 技术, 且模拟过程中严格保持计算区域体积不变, 因此命名为事件驱动常体积法(event-driven constant volume method, EDCV). 其流程如图 1 所示.

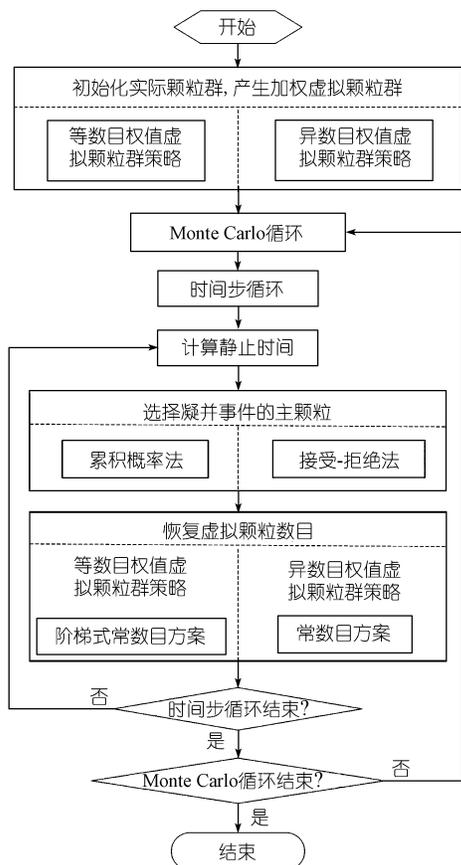


图 1 事件驱动常体积法的流程图

由于“等数目权值模拟颗粒策略”在某些特殊工况(如单分散性分布或离散分布颗粒群凝并工况)下天然存在, 且一定程度上具有计算精度和计算效率的优势(下文将详细谈到), 所以本文的 EDCV 具有两个版本, 即基于“异数目权值模拟颗粒策略”的 EDCV-1 和基于“等数目权值模拟颗粒策略”的 EDCV-2, 它们的具体配置如图 1 所示. 下面介绍这种新的随机方法的关键之处.

### 1.3 动力学事件的发生速率

在事件驱动 MC 中, 必须首先计算动力学事件的速率(单位时间单位体积内发生动力学事件的概率), 以便于之后计算两个动力学事件之间的等待时间(静止时间)和选择主事件(在等待时间之后发生的动力学时间)、主颗粒(承担主事件的虚拟颗粒). 虚拟颗粒之间的凝并速率取决于不同的虚拟颗粒数目权值赋值策略.

对于数目权值相等且均为 1 的虚拟颗粒(实际上是实际物理颗粒)的凝并过程, 其凝并速率  $R_{\text{coag}}$  (量纲为是  $\text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ ) 为<sup>[6]</sup>

$$R_{\text{coag}} = \frac{1}{2V_s^2} \sum_{i=1}^{N_f} \sum_{j=1, i \neq j}^{N_f} \beta_{ij} = \frac{1}{V_s^2} \sum_{i=1}^{N_f} \sum_{j=i+1}^{N_f} \beta_{ij}, \quad (2)$$

其中,  $V_s$  为计算区域体积;  $N_f$  为虚拟颗粒总数目;  $\beta_{ij}$  为虚拟颗粒  $i$  和  $j$  的凝并核.

对于两颗粒数目权值相等但公共数目权值  $w \neq 1$  的虚拟颗粒  $i$  和  $j$  (数目权值分别为  $w_i$  和  $w_j$ ,  $w_i=w_j=w$ ; 尺度分别为  $v_i$  和  $v_j$ ) 的凝并事件, 可理解为虚拟颗粒  $i$  所代表的一组实际颗粒 (颗粒数目浓度为  $w_i/V_s$ , 尺度为  $v_i$ ) 和虚拟颗粒  $j$  所代表的一组实际颗粒 (颗粒数目浓度为  $w_j/V_s$ , 尺度为  $v_j$ ) 之间的凝并事件, 此时单位时间单位体积内发生的实际凝并事件 (两实际颗粒间的凝并事件) 的总数目  $N'_{ij}$  (量纲为  $\text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ) 为

$$N'_{ij} = \beta_{ij} \times \frac{w_i}{V_s} \times \frac{w_j}{V_s}. \quad (3)$$

所以单位时间单位体积内虚拟颗粒  $i$  所代表的所有实际颗粒所发生的凝并事件的总次数为

$$N'_i = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_f} N'_{ij} = \frac{1}{V_s^2} \sum_{j=1, j \neq i}^{N_f} (\beta_{ij} \times w_i \times w_j). \quad (4)$$

由于虚拟颗粒  $i$  代表了  $w_i$  个实际颗粒, 所以单位时间单位体积内虚拟颗粒  $i$  所代表的每颗实际颗粒平均发生的凝并事件的次数为

$$C'_i = \frac{N'_i}{w_i} = \frac{1}{V_s^2} \sum_{j=1, i \neq j}^{N_f} (\beta_{ij} \times w_j). \quad (5)$$

由于虚拟颗粒  $i$  是它所代表的那些实际颗粒的指示器, 所以虚拟颗粒  $i$  在单位时间单位体积内发生的凝并事件的次数就是  $C'_i$ . 这样单位时间单位体积内凝并事件的发生概率  $R'_{\text{coag}}$  为

$$R'_{\text{coag}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_f} C'_i = \frac{1}{2V_s^2} \sum_{i=1}^{N_f} \sum_{j=1, i \neq j}^{N_f} (\beta_{ij} \times w_j) = \frac{1}{2V_s^2} \sum_{i=1}^{N_f} \sum_{j=1, i \neq j}^{N_f} (w\beta_{ij}) = \frac{w}{V_s^2} \sum_{i=1}^{N_f} \sum_{j=i+1}^{N_f} \beta_{ij}. \quad (6)$$

这就是“等数目权值虚拟颗粒群策略”下的凝并速率, 它的计算实际上是基于所对应的“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”, 即认为虚拟颗粒  $i$  和  $j$  所代表的每一颗实际颗粒均具有 100% 的概率来参与了一次凝并事件. 这种“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”无法准确描述“异数目权值虚拟颗粒群策略”下数目权值不等的虚拟颗粒的凝并过程, 本文因此建立了“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”. 在这种新的凝并准则下, 认为虚拟颗粒  $i$  和  $j$  之间发生的实际颗粒凝并事件次数为  $\min(w_i, w_j)$ , 也就是说, 虚拟颗粒  $i$  中的每颗实际颗粒只可能与虚拟颗粒  $j$  中的  $\min(w_i, w_j)$  颗实际颗粒存在发生凝并事件的可能, 反之亦然. 因此, 虚拟颗粒  $i$  所代表的每颗实际颗粒发生凝并事件的概率为  $\min(w_i, w_j)/w_i$ , 而虚拟颗粒  $j$  所代表的每颗实际颗粒发生凝并事件的概率为  $\min(w_i, w_j)/w_j$ , 这两个概率均小于等于 100%.

需要建立起“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”和“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”之间的内在联系才能得到“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”下的凝并速率. 首先考察“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”下实际颗粒的凝并概率. 在“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”中, 虚拟颗粒  $i$  所代表的每颗实际颗粒可能与虚拟颗粒  $j$  所代表的  $w_j$  颗实际颗粒中的任何一颗发生一次实际凝并事件, 同样, 虚拟颗粒  $j$  所代表的每颗实际颗粒可能与虚拟颗粒  $i$  所代表的  $w_i$  颗实际颗粒中的任何一颗发生一次凝并事件, 所以虚拟颗粒  $i$  和  $j$  中每颗实际颗粒可能与之相互作用的颗粒的数目的平均值为

$$c' = \frac{w_i \times w_j + w_i \times w_j}{w_i + w_j} = \frac{2w_i w_j}{w_i + w_j}, \quad (7)$$

如果  $w_i=w_j=w$ , 则  $c' = w$ . 如果  $\tau'$  为“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”中发生一次实际凝并事件所消耗的时间长度, 则此时实际颗粒的凝并速率为  $c'/\tau'$ . 而在“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中, 虚拟颗粒  $i$  或  $j$  所代表的每颗实际颗粒可能与虚拟颗粒  $j$  或  $i$  所代表的  $\min(w_i, w_j)$  颗实际颗粒中的任何一颗发生一次实际凝并事件, 所以每颗实际颗粒可能与之相互作用的颗粒的数目的平均值  $c''$  也为  $\min(w_i, w_j)$ . 如果  $w_i=w_j=w$ , 则  $c'' = w$ . 如果  $\tau''$  为“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中发生一次实际凝并事件所消耗的时间长度, 则新准则下实际颗粒的凝并速率为  $c''/\tau''$ . 在两种凝并准则中, 平均每颗实际颗粒的凝并速率是相等, 即

$$\frac{c'}{\tau'} = \frac{c''}{\tau''},$$

或者

$$\frac{2w_i w_j}{w_i + w_j} \frac{1}{\tau'} = \frac{\min(w_i, w_j)}{\tau''}, \quad (8)$$

于是

$$\tau'' = \frac{(w_i + w_j) \times \min(w_i, w_j)}{2w_i w_j} \tau' \leq \tau'. \quad (9)$$

所以, 在“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中虚拟颗粒  $i$  和  $j$  之间单位时间单位体积内凝并次数  $N''_{ij}$  和“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”中的  $N'_{ij}$  存在如下关系

$$N'_{ij} \times V_s \times \tau' = N''_{ij} \times V_s \times \tau'', \quad (10)$$

即

$$N''_{ij} = \left[ \beta_{ij} w_i w_j \frac{2w_i w_j}{(w_i + w_j) \times \min(w_i, w_j)} \right] / V_s^2. \quad (11)$$

类似于“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”下凝并速率  $R'_{\text{coag}}$  的推导, 可以得到“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”的控制下凝并速率  $R''_{\text{coag}}$  的计算公式为

$$R''_{\text{coag}} = \frac{1}{2V_s^2} \sum_{i=1}^{N_f} \sum_{j=1, j \neq i}^{N_f} \left[ \beta_{ij} w_j \frac{2w_i w_j}{(w_i + w_j) \times \min(w_i, w_j)} \right] = \frac{1}{V_s^2} \sum_{i=1}^{N_f} T_i, \quad (12)$$

$$T_i = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_f} \left[ \frac{\beta_{ij} w_i w_j^2}{(w_i + w_j) \times \min(w_i, w_j)} \right]. \quad (13)$$

当  $w_i=w_j=w$  时,  $R''_{\text{coag}} = R'_{\text{coag}}$ ; 更特殊地,  $w_i=w_j=w=1$  时,  $R''_{\text{coag}} = R'_{\text{coag}} = R_{\text{coag}}$ . 所以“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”是“异数目权值虚拟凝并准则”的一种特例.

#### 1.4 等待时间的计算

不管是时间驱动 MC 还是事件驱动 MC, 一个共同的基础是认为离散系统中动力学事件的发生是一个标准的 Markov 过程, 两次动力学事件之间的等待时间(静止时间)满足指数分布. 在事件驱动 MC 体系中, 根据文献<sup>[13]</sup>, 第  $k-1$  个事件之后的等待时间  $\Delta t_k$  与凝并概率  $R_{\text{coag},k}''$  成反比, 即

$$\Delta t_k = 1 / (V_s R_{\text{coag},k}''). \quad (14)$$

#### 1.5 主颗粒的选择

如果认为离散系统中只发生某种动力学事件  $l$ , 则主事件(即在等待时间之后将要发生的事件)就是该事件  $l$ (本文为凝并事件), 此时需要确定承担凝并事件的两颗主颗粒. 某两颗虚拟颗粒  $i$  和  $j$  发生凝并事件的概率满足如下分布

$$\beta(v_i, v_j) / \sum_i \sum_{j, j \neq i} \beta(v_i, v_j). \quad (15)$$

主颗粒的选择可以通过两种方法来实现, 即累积概率法(cumulative probabilities method)和接受-拒绝法(acceptance-rejection method). 这两种方法都遵守虚拟颗粒发生该事件的概率分布. 累积概率法(或称为倒数法)选择主颗粒的过程如下: 首先, 如图 2 的步骤 1 所示, 如果随机数  $r$  满足如下条件, 则虚拟颗粒  $i$  为一颗主颗粒

$$\frac{\Delta t_k}{V_s} \sum_{m=1}^{i-1} T_m < r \leq \frac{\Delta t_k}{V_s} \sum_{m=1}^i T_m, \quad (16)$$

然后, 另外一颗主颗粒, 虚拟颗粒  $i$  的凝并伙伴  $j$ , 通过如下遍历程序实现(图 2 中的步骤 2)

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t_k}{V_s} \left( \sum_{m=1}^{i-1} T_m + \sum_{m=1, m \neq i}^{j-1} \frac{\beta_{im} w_i w_m^2}{(w_i + w_m) \times \min(w_i, w_m)} \right) < r \\ \leq \frac{\Delta t_k}{V_s} \left( \sum_{m=1}^{i-1} T_m + \sum_{m=1, m \neq i}^j \frac{\beta_{im} w_i w_m^2}{(w_i + w_m) \times \min(w_i, w_m)} \right). \end{aligned} \quad (17)$$

在累积概率法中, 两次虚拟颗粒遍历过程可能消耗较大的计算代价, 特别是虚拟颗粒数目较多时, 而接受-拒绝法在某些工况下可以提高主颗粒选择过程的计算效率. 在这种方法中, 首先通过随机过程选择两颗虚拟颗粒  $i$  和  $j$ , 如果随机数  $r$  满足如下条件, 则认为虚拟颗粒  $i$  和  $j$  为发生凝并事件的两颗主颗粒

$$r \leq \frac{\beta_{ij}^0}{\beta_{\max}^0} = \frac{\beta_{ij}^0 w_j \frac{2w_i w_j}{(w_i + w_j) \times \min(w_i, w_j)}}{\max_{\forall k, \forall m} \left\{ \beta_{km}^0 w_k \frac{2w_k w_m}{(w_k + w_m) \times \min(w_k, w_m)} \right\}}, \quad (18)$$

这里,  $\beta_{ij}^0$  为“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”下虚拟颗粒  $i$  和  $j$  的特定凝并核, 而  $\beta_{\max}^0$  是“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中所有可能的凝并对的最大凝并核. 如果  $\beta_{\max}^0$  被高估, 虽然选择一对主颗粒的效率相应降低, 但是仍然能够描述该 Markov 过程.

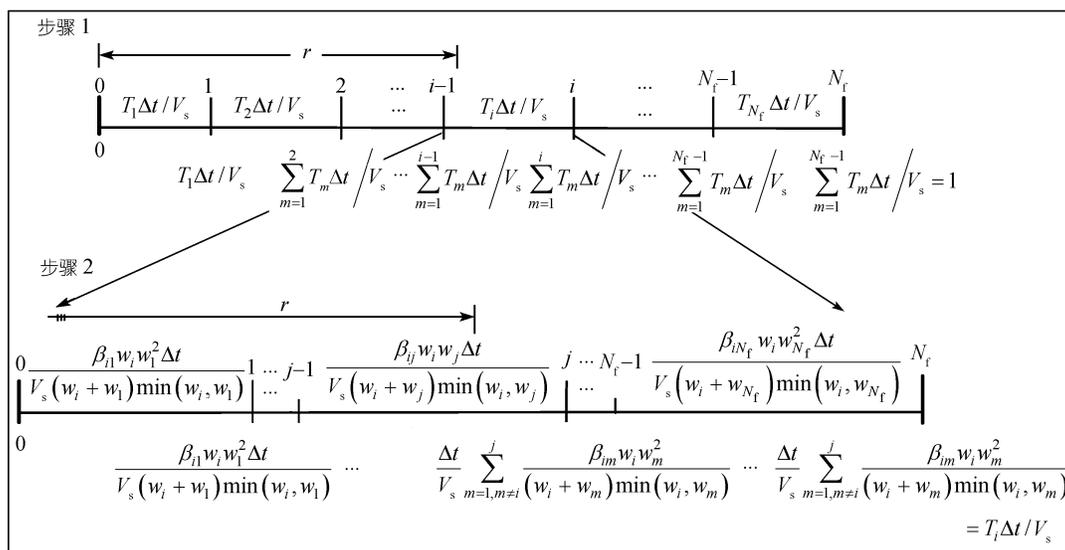


图 2 累积概率法实现主颗粒的选择

### 1.6 虚拟颗粒数目的恢复和计算区域体积的保持

无论对于何种 MC, 在动力学演变过程中, 模拟颗粒数目和计算区域体积是两个需要特别关注的变量. 过多的模拟颗粒数目将加剧计算代价, 而过少的模拟颗粒数目则影响计算精度; 计算区域的变动则影响算法的扩展性和工程应用. 事件驱动常数目法发展了一系列方法, 在严格保持常体积的同时, 尽可能把虚拟颗粒数目保持在一定范围之内.

**1.6.1 异数目权值虚拟颗粒群策略.** 当数目权值不等的两颗虚拟颗粒  $i$  和  $j$  发生凝并时, 它们所代表的实际颗粒组中, 均仅只有  $\min(w_i, w_j)$  颗实际颗粒发生了实际凝并事件, 生成了  $\min(w_i, w_j)$  颗尺度为  $(v_i+v_j)$  的新的颗粒. 所以虚拟颗粒  $i$  和  $j$  发生凝并之后, 将有两类颗粒存在, 一类是实际颗粒凝并事件所产生的“新”颗粒, 一类是没有参与实际颗粒凝并事件的“旧”颗粒. 新颗粒和旧颗粒分别重新被两虚拟颗粒  $i$  和  $j$  所代表. 假设凝并前  $i$  的数目权值  $(w_i)_{old}$  大于  $j$  的数目权值  $(w_j)_{old}$ , 凝并之后虚拟颗粒的数目权值  $w$ 、尺度  $v$  为

$$\begin{cases} (w_i)_{new} = (w_i)_{old} - (w_j)_{old}; (v_i)_{new} = (v_i)_{old}, \\ (w_j)_{new} = (w_j)_{old}; (v_j)_{new} = (v_i)_{old} + (v_j)_{old}. \end{cases} \quad (19)$$

此时, 虽然实际颗粒数目随凝并过程而不断减少, 但是虚拟颗粒总数目自动保持不变, 称为“常数目方案”.

**1.6.2 等数目权值虚拟颗粒群策略.** 在“常数目方案”中, 以主颗粒的数目权值不断改变来反映该凝并事件的结果, 并自动保持“常数目”和“常体积”特征, 但是我们的研究表明, 虚拟颗粒数目权值的扰动将不可避免的带来所谓的“常数目误差”, 且使得 MC 的计算效率降低<sup>[10]</sup>. 实际上, 在某些工况(如单分散性分布或离散分布颗粒群凝并工况)中, 初始化之后虚拟颗粒群可能具有相等的数目权值, 即采用“等数目权值虚拟颗粒群策略”. 此时在对凝并事件进行处理时,

可以保持所有虚拟颗粒的数目权值在任何时刻均相等, 而虚拟颗粒数目在  $N_{i0}/2 \sim 2N_{i0}$  ( $N_{i0}$  为初始虚拟颗粒数目) 之间波动, 以此来尽可能避免对虚拟颗粒数目权值的扰动, 从而尽可能提高这种特殊工况下 MC 的计算精度和计算效率. 此时认为虚拟颗粒  $i$  和  $j$  的凝并事件将产生一颗尺度为  $(v_i+v_j)$  的虚拟颗粒  $k$ , 其数目权值仍然等于公共权值  $w$ , 把虚拟颗粒  $k$  取代虚拟颗粒  $i$ , 并抛弃虚拟颗粒  $j$ . 此时一次凝并事件将导致虚拟颗粒总数目减 1.

随着凝并事件的不断进行, 虚拟颗粒总数目将不断减少, 这会严重损害 MC 的统计精度. 本文发展了“阶梯式常数方案”来恢复虚拟颗粒数目以保持计算精度和计算代价. 当虚拟颗粒总数目减少到初始总数目的一半 ( $N_{i0}/2$ ) 时, 把现存的所有虚拟颗粒逐一复制一份, 把复制的这些虚拟颗粒加入原有虚拟颗粒序列, 使得虚拟颗粒总数目恢复到  $N_{i0}$ , 并把所有这些虚拟颗粒的数目权值减半, 而尺度等属性均不变.

至此, 依据流程图 1, 可以利用该 EDCV 描述颗粒群的凝并动力学过程, 下面通过与其他主流 MC 的比较来评价该方法的性能.

## 2 事件驱动常体积法与几种主流 MC 方法的比较

颗粒群平衡模拟描述颗粒凝并事件时, MC 的计算精度和计算效率与动力学事件核模型的类型无关, 而仅仅取决于 MC 本身, 所以一般均采用具有理论分析解的特殊工况来验证 MC 的性能, 并进而把优选算法推广到普通工况中. 本文选择常凝并核工况来验证 EDCV 的性能, 这种工况中颗粒凝并事件的发生概率与颗粒尺度无关.

### 2.1 初始单分散性颗粒群的常凝并核工况

初始时刻所有颗粒尺度均为  $v_0=1$  (无量纲), 初始颗粒数目浓度  $N_0=10^{10} \text{ m}^{-3}$ , 凝并核  $\beta_{ij}=A=10^{-10} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ , 颗粒特征凝并时间尺度定义为  $\tau_{\text{coag}}=1/(N_0A)$ , 颗粒数目浓度、质量浓度和特定时刻 PSDF 的理论分析解参照文献[14].

作者建立了零维 PBM 随机算法对 PSDF 时间演变过程描述精度的定量评判方法 (针对初始单分散性颗粒群工况)<sup>[10]</sup>, 采用各种关键参数 (颗粒数目浓度、颗粒质量浓度、颗粒尺度分布函数) 的平均误差或平均方差来评价 MC 算法的计算精度. 多次 MC 循环的颗粒数目浓度  $N$  的瞬时平均方差  $\sigma_N(t)$ 、颗粒质量浓度  $M$  的瞬时平均方差  $\sigma_M(t)$  分别为

$$\sigma_N(t) = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^Q \sigma_{C,i}(t), \quad \sigma_{N,i}(t) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \left( \frac{N_j - N_{j,\text{theory}}}{N_{j,\text{theory}}} \right)^2}, \quad (20)$$

$$\sigma_M(t) = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^Q \sigma_{M,i}(t), \quad \sigma_{M,i}(t) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \left( \frac{M_j - M_{j,\text{theory}}}{M_{j,\text{theory}}} \right)^2}, \quad (21)$$

其中,  $Q$  为 MC 循环的次数;  $\sigma_{N,i}(t)$  和  $\sigma_{M,i}(t)$  分别为第  $i$  次 MC 循环中、 $t$  时刻  $N$  和  $M$  的瞬时平均方差;  $L$  为  $0 \sim t$  范围内离散的时间窗口的数目,  $N_j$  和  $M_j$  分别为第  $j$  个时间窗口, 即  $t = \sum_{m=1}^j \Delta t_m$  时刻处的  $N$  和  $M$  的 MC 模拟值,  $N_{j,\text{theory}}$  和  $M_{j,\text{theory}}$  分别为对应时刻处的  $N$  和  $M$  的理论值.

类似地, 对于初始单分散性颗粒群工况, 可以定义颗粒尺度分布函数的整体方差如下

$$\sigma_d(t) = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^Q \sigma_{d,i}(t), \quad \sigma_{d,i}(t) = \sqrt{\frac{1}{k_{\max} - k_{\min} + 1} \sum_{j=k_{\min}}^{k_{\max}} \left( \frac{P_j(t) - P_{j,\text{theory}}(t)}{n_{\text{total}}} \right)^2}, \quad (22)$$

其中,  $P_j(t)$  为  $t$  时刻得到含有  $j$  个单体的颗粒的概率;  $n_{\text{total}}$  为无量纲的颗粒数目浓度,  $n_{\text{total}} = 1/\bar{v} = N(t)_{\text{theory}} v_0 / M(t)_{\text{theory}}$ ,  $\bar{v}$  为无量纲的颗粒平均尺度;  $k_{\max}$  和  $k_{\min}$  分别为颗粒群中尺度最大和最小的颗粒所包含的单体颗粒(初始颗粒)的数目.

把 EDCV 算法与阶梯式常体积法<sup>[7]</sup>、常数目法<sup>[8]</sup>和 MMC 算法<sup>[9,11,12]</sup>进行定量比较, 其中 EDCV-1 为采用“异数目权值虚拟颗粒群策略”和“常数目方案”的 EDCV 法, EDCV-2 为采用“等数目权值虚拟颗粒群策略”和“阶梯式常数目方案”的 EDCV 法. 这种工况主要用于检验 EDCV 算法所基于的“异数目权值虚拟颗粒群策略”、“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”等的正确性. 其中两种 EDCV 法均采用接受-拒绝法实现主颗粒的选择. 在几种 MC 中, 初始模拟颗粒数目均为 1000, MMC 中乘积因子  $\alpha$  为 0.01. 系统演变时间长度为 1000 s, 计算结果如图 3 所示, 在同一台计算机(Althon 2500+, 512M)上消耗的 CPU 时间  $T_{\text{CPU}}$  如表 1 所示.

表 1 各种 MC 对各工况的计算代价

参数	阶梯式常体积法	常数目法	MMC	EDCV-1	EDCV-2
$T_{\text{CPU/s, Case1}}$	18.07	45.15	13.01	331.04	20.27
$T_{\text{CPU/s, Case2}}$	-	-	43.83	8392.72	144.02

由图 3 模拟结果可知, EDCV-2 的模拟结果类似于阶梯式常数目法, 这表明阶梯式常体积法实际上是 EDCV 算法的一种特例. 实际上, EDCV-2 算法跟踪整体系统, 每颗虚拟颗粒均具有相同的数目权值, 它通过公共数目权值的倍减来恢复虚拟颗粒数目; 而阶梯式常体积法跟踪子系统, 子系统内每颗模拟颗粒的公共数目权值为  $w_s=1$ , 从整体系统(其体积为  $V$ )来看, 每颗模拟颗粒的公共数目权值为  $w = V/V_s$ , 它通过子系统的倍增来实现模拟颗粒数目的恢复, 实际上也是实现整体系统中公共数目权值  $w$  的倍减; 所以两种算法本质上是相同的, 只是基于不同的跟踪系统而采用不同的数目权值倍减方案而已.

然而, 恒定地保持模拟颗粒数目不变的 EDCV-1 的对于颗粒数目浓度  $N$  的模拟结果精度, 虽然稍微高于 MMC 算法和常数目法, 但是低于 EDCV-2(参见图 3(a)和(d)). 这是因为恢复虚拟颗粒数目和保持计算区域的过程中将对模拟颗粒群产生一定程度的人为扰动, 从而引入了数值误差, 扰动程度越小, 扰动次数越少, 数值误差也越小. 对于颗粒尺度分布的各阶矩(颗粒总数目浓度和总质量浓度等), 阶梯式恢复虚拟颗粒数目的方法(阶梯式常体积法所采用的倍增计算区域的办法, EDCV-2 所采用的倍减虚拟颗粒公共数目权值的办法)所表现的“阶梯式误差”比连续式恢复模拟颗粒数目的方法(EDCV-1 和 MMC 算法采用的调整虚拟颗粒数目权值的方法, 常数目法中采用的实时调整计算区域的方法)所表现的“常数目误差”要相对小一些. 而几种事件驱动 MC(包括两种 EDCV)对于颗粒质量浓度的描述均能达到严格的精度, 比时间驱动 MC 精度更高(参见图 3(b)和(e)), 主要归因于事件驱动 MC 天生就避免了时间驱动 MC(包括 MMC 算法)所固有的解耦假设和“解耦误差”的缘故.

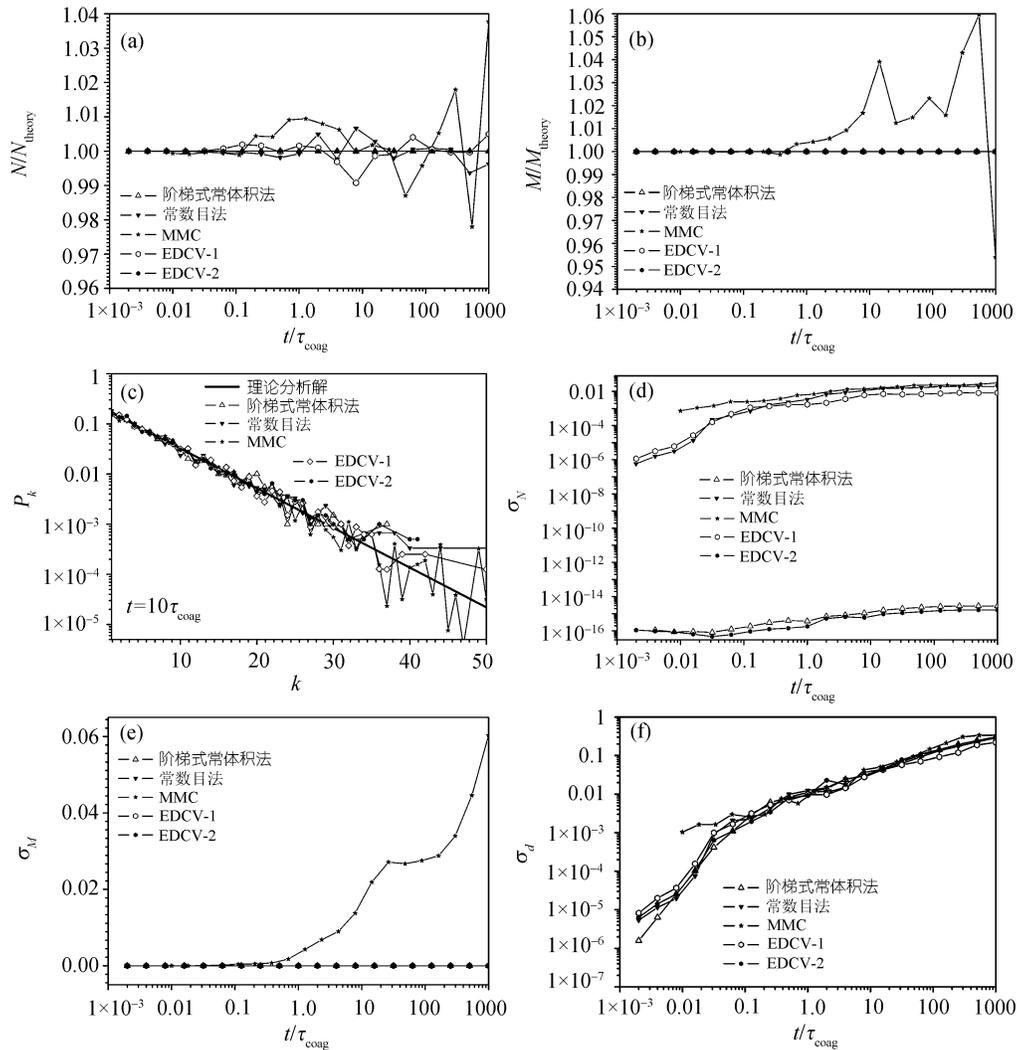


图3 初始单分散性颗粒群的常凝并核工况

(a) 颗粒数目浓度; (b) 颗粒质量浓度; (c) 颗粒尺度分布; (d) 颗粒数目浓度的平均方差;  
 (e) 颗粒质量浓度的平均方差; (f) 颗粒尺度分布函数的整体方差

几种 MC 对于颗粒尺度分布函数的时间演变过程均能达到相当的精度(参见图3(c)和(f)). 实际上, MC 算法对于颗粒尺度分布函数的描述精度主要取决于模拟颗粒数目, 当模拟颗粒数目达到  $O(10^3)$  量级时, 在同样的初始模拟颗粒数目的条件下, 尽管模拟过程中几种 MC 算法的模拟颗粒数目并不完全相等, 但是几种 MC 算法对 PSDF 时间演变均具有几乎同样的描述精度. 值得注意的是, 对于基于“异数目权值虚拟颗粒群策略”的 EDCV-1 和 MMC, 由于可以分配一些数目权值较小的虚拟颗粒来代表那些实际颗粒数目较少的颗粒类(如本算例中的颗粒尺度谱的高端部分), 从而可以更精确地捕捉颗粒尺度分布高端部分的动力学演变(图 3(c)).

几种 MC 的计算代价的比较如表 1 所示, EDCV-1 的较高计算代价归结为两个因素: 1) 计算凝并概率时计算代价为  $O(N_f^2)$ , 而等数目权值虚拟颗粒策略的 MC(阶梯式常体积法、常数目法和 EDCV-2) 此时的计算代价为  $O(N_f^2)$  的一半; 2) EDCV-1 中跟踪的虚拟颗粒数目为  $N_{f0}$ , 但是阶梯式常体积法和 EDCV-2 跟踪的虚拟颗粒数目为  $N_{f0}/2 \sim N_{f0}$ .

对于这种初始单分散性颗粒群的凝并工况, 整体而言, 基于“异数目权值虚拟颗粒群策略”的 EDCV-1 比基于“等数目权值虚拟颗粒群策略”的 EDCV-2 在计算精度和计算效率方面处于下风, 除了上述的原因外, 还因为: 在初始时刻基于单分散性实际颗粒群生成虚拟颗粒群时, 不存在离散误差; 另外一方面, 随着时间的推移, 颗粒群的几何标准偏差越来越大, 即颗粒间的尺度差异越来越大, 可以预见, 此时 EDCV-1 将更能准确描述那些数目浓度较小的颗粒类的凝并动力学, 从而计算精度比 EDCV-2 高. 因此, EDCV-2 可以推荐描述初始单分散性颗粒群在较短时间内的凝并过程.

## 2.2 初始多分散性颗粒群的常凝并核工况

这种工况中, 初始时刻颗粒尺度分布函数满足指数分布

$$n(v, 0) = N_0 / v_{g0} \times \exp(-v / v_{g0}), \quad (23)$$

其中, 初始颗粒平均尺度  $v_{g0} = 0.029 \mu\text{m}^3$ , 初始颗粒数目浓度  $N_0 = 10^6 \text{cm}^{-3}$ , 凝并核  $\beta_{ij} = A = 6.405 \times 10^{-10} \text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ , 凝并特征时间尺度定义为  $\tau_{\text{coag}} = 2 / (AN_0) \approx 1561.3 \text{s}$ . 这种工况主要用于检验 EDCV 对于初始多分散性颗粒群凝并过程的描述精度. 两种 EDCV 法均采用累积概率法实现主颗粒的选择. 把两种 EDCV 与理论分析解<sup>[14]</sup>及 MMC 算法<sup>[12]</sup>进行比较. 对连续分布的实际颗粒群进行初始化时, 初始虚拟颗粒数目均设置为 3000, 且均按照对数分类法则在  $10^{-5} \sim 1 \mu\text{m}^3$  的区间把颗粒尺度谱分为 200 类, 设定每个颗粒类至少由 10 个虚拟颗粒所代表. 于是 EDCV-1 和 MMC 最终跟踪的虚拟颗粒总数目始终为 4040, 而 EDCV-2 初始跟踪的虚拟颗粒总数目为 3160, 并且凝并过程中在 1580~3160 之间波动.

由图 4 可知, 两种 EDCV 均相对高精度地描述了颗粒尺度分布函数的各阶矩、特定时刻颗粒尺度分布函数. 但是 EDCV-1 由于“常数目误差”而对颗粒数目浓度  $N$  有一定偏差, 但是精确描述了颗粒质量浓度  $M$  的演变; 在对连续型指数分布的实际颗粒尺度谱进行初始化时, 采用“等数目权值虚拟颗粒群策略”的 EDCV-2 由于无法完全继承实际颗粒群的颗粒尺度分布函数的信息, 实际颗粒群的颗粒尺度谱的高端和低端部分都无法被虚拟颗粒群所描述, 所以存在明显的“离散误差”, 并影响了 EDCV-2 对于  $N, M$  和特定时刻颗粒尺度分布函数的描述精度. 而采用“异数目权值虚拟颗粒群策略”的 EDCV-1 和 MMC 则能完整地描述整个尺度范围内的凝并动力学过程, 特别是对尺度谱高端和低端部分的描述. 另外, 由于基于时间驱动 MC 的 MMC 算法所固有的解耦假设和解耦误差, 它对于  $N$  的精度低于 EDCV-2(参见图 4(a)), 对于  $M$  的精度低于 EDCV-1 和 EDCV-2(参见图 4(b)), 对于颗粒尺度分布函数的精度整体上低于 EDCV-1, 表现为更大和更多的脉动(参见图 4(c)).

几种算法对于该工况的计算代价的比较如表 1 所示, 可知, 采用“异数目权值虚拟颗粒群策略”的 MC 算法(EDCV-1)比采用“等数目权值虚拟颗粒群策略”的 EDCV-2 计算代价更大, 这同样归因于 EDCV-1 耗费更多的计算代价得到凝并速率和跟踪更多的虚拟颗粒.

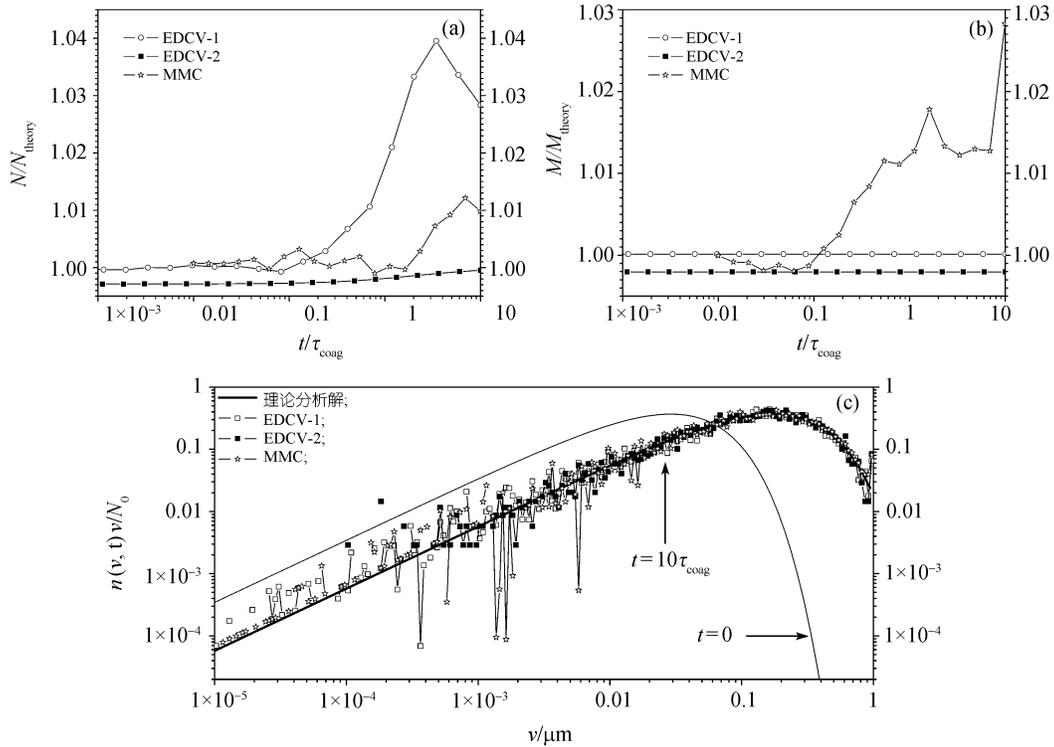


图4 初始指数分布颗粒群的常凝并核工况

(a) 颗粒数目浓度; (b) 颗粒质量浓度; (c) 颗粒尺度分布函数的时间演变

对于这种初始多分散性颗粒群的凝并工况, 整体而言, 相比较于基于“等数目权值虚拟颗粒群策略”的 EDCV-2, 基于“异数目权值虚拟颗粒群策略”的 EDCV-1 的计算精度要更高一些. 主要是因为: 在 EDCV-2 中, 初始阶段所引入的较大“离散误差”在模拟过程中得到繁殖甚至放大. 因此, EDCV-1 更适合于描述初始多分散性颗粒群的凝并动力学.

### 3 结论

基于事件驱动 MC 对解藕误差的免疫以及高计算精度和效率的认识, 本文发展了一种新的事件驱动常体积(EDCV)法. EDCV 引入加权虚拟颗粒的概念和保持常体积特征, 并把“等数目权值虚拟颗粒策略”和“异数目权值虚拟颗粒策略”、“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”和“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”、累计概率法和接受-拒绝法等技术统一在一个框架下, 且在事件驱动 MC 的框架下处理凝并动力学过程.

通过对多种主流 MC 的定量比较, 证明 EDCV 方法能够较高精度和较高效率地描述初始单分散或多分散颗粒群的凝并动力学过程, 其中基于“等数目权值虚拟颗粒群策略”的 EDCV-2 由于尽量避免了虚拟颗粒数目权值的扰动而具有较小的“阶梯式误差”, 且跟踪数目较少的虚拟颗粒群, 故能在某些特殊工况(如初始单分散或离散分布颗粒群凝并工况)中高精度和高效率地描述颗粒凝并过程, 但是它无法精确自然界和工程界更为普遍的多分散颗粒群全尺度范围内的凝并过程, 这正是基于“异数目权值虚拟颗粒群策略”的 EDCV-1 的优势. EDCV-1 虽然

由于对虚拟颗粒数目权值的频繁扰动而具有较大的“常数误差”(具体表现在对颗粒数目浓度的描述精度低于 EDCV-2),但是能够精确描述颗粒质量浓度,且能更高精度地描述多分散颗粒群全尺度范围内的凝并过程,其代价是计算效率相对 EDCV-2 要低一些.实际上 EDCV-2 是 EDCV-1 的一种特例.两种版本的 EDCV 的适用范围需要具体分析,如果对于初始单分散或离散分布颗粒群凝并工况,或者某些计算精度要求不高的多分散颗粒群工况,可以选择 EDCV-2,而对于某些要求描述多分散颗粒群全尺度范围内凝并动力学的工况,则推荐使用 EDCV-1.总体而言,模拟结果证明 EDCV 法已经成为目前零维 PBM 数值算法中计算精度和计算效率最高的随机算法之一.

描述颗粒尺度分布函数时间和空间演变的多维颗粒群平衡模拟已经成为当前极富挑战性的科学和工程需求.以本文所发展的描述零维颗粒群平衡模拟的事件驱动常体积法为基础,耦合两相湍流模型以实现多维颗粒群平衡模拟是值得探讨的研究方向,其难点在于如何把描述颗粒动力学演变过程的事件驱动框架与描述两相流场的时间驱动框架统一在一个体系之内.这将是下阶段值得继续的研究内容之一.

## 参考文献

- 1 Hounslow M J. Population balance modelling of particulate systems. *Chem Eng Sci*, 2002, 57(12): 2123
- 2 Ramkrishna D. *Population Balances: Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. San Diego: Academic Press, 2000
- 3 赵海波, 郑楚光, 徐明厚. 离散系统通用动力学方程求解算法的研究进展. *力学进展*, 2006, 36(1): 125—141
- 4 Liffman K. A direct simulation Monte-Carlo method for cluster coagulation. *J Comp Phys*, 1992, 100(1): 116—127
- 5 Garcia A L, van den Broek C, Aertsens M, et al. A Monte Carlo simulation of coagulation. *Phys A: Stat Theor Phys*, 1987, 143(3): 535—546
- 6 Lin Y, Lee K, Matsoukas T. Solution of the population balance equation using constant-number Monte Carlo. *Chem Eng Sci*, 2002, 57(12): 2241—2252
- 7 Kruis F E, Maisels A, Fissan H. Direct simulation Monte Carlo method for particle coagulation and aggregation. *AIChE J*, 2000, 46(9): 1735—1742
- 8 Maisels A, Kruis F E, Fissan H. Direct simulation Monte Carlo for simultaneous nucleation, coagulation, and surface growth in dispersed systems. *Chem Eng Sci*, 2004, 59(11): 2231—2239
- 9 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. *中国科学 E 辑: 技术科学*, 2006, 36(3): 270—284
- 10 Zhao H, Maisels A, Matsoukas T, et al. Analysis of four Monte Carlo methods for the solution of population balances in dispersed systems. *Powder Tech*, 2007, 173(1): 38—50
- 11 Zhao H, Zheng C, Xu M. Multi-Monte Carlo approach for general dynamic equation considering simultaneous particle coagulation and breakage. *Powder Tech*, 2005, 154(2-3): 164—178
- 12 Zhao H, Zheng C, Xu M. Multi-Monte Carlo method for coagulation and condensation/evaporation in dispersed systems. *J Coll Interface Sci*, 2005, 286(1): 195—208
- 13 Shah B H, Ramkrishna D, Borwanker J D. Simulation of particulate systems using the concept of the interval of quiescence. *AIChE J*, 1977, 23(6): 897—904
- 14 Seinfeld J H. *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*. New York: Wiley, 1986