

文章编号: 0258-1825(2006)02-0144-06

描述颗粒沉积动力学演变过程的一种随机算法

赵海波, 郑楚光

(华中科技大学煤燃烧国家重点实验室, 湖北 武汉 430074)

摘要: 为了解决普通 Monte Carlo 算法计算精度和计算代价无法协调的矛盾, 发展了一种新的多重 Monte Carlo (MMC) 算法求解考虑多分散性颗粒沉积的通用动力学方程, 该算法引入加权虚拟颗粒的概念, 基于时间驱动 Monte Carlo 技术, 模拟过程中保持虚拟颗粒数目和计算区域体积不变。首先详细介绍了考虑颗粒沉积的 MMC 算法, 包括时间步长的设置、颗粒是否沉积的判断、沉积后果的处理等。然后选定三个存在理论分析解的特殊工况对 MMC 算法进行验证, 数值模拟结果与相应的理论分析解符合很好, 表明该算法具有较高的计算精度, 同时该算法计算代价很小。

关键词: 通用动力学方程; Monte Carlo 算法; 沉积; 颗粒物; 多分散性

中图分类号: TK121; O359 **文献标识码:** A

0 引言

颗粒物在流体介质中迁移、输运、扩散等时, 由于各种不同的机理, 如重力作用、布朗扩散、湍流扩散和输运、电荷吸附、湿去除等, 会在壁面边界上沉积下来^[1]。沉积过程广泛存在于自然和工业过程中, 如大气中气溶胶的自然脱除、雨雪雾冰等降落、化工中乳胶体和絮凝物的沉积、火电厂中烟道内飞灰颗粒的壁面沉积、核反应堆的安全性分析中模拟爆炸过程中气溶胶的扩散沉降过程、室内空气污染物的迁移等^[2]。目前主要通过研究颗粒的终端速度^[3]或沉积系数^[4]描述颗粒的沉积过程。离散颗粒系统的一个重要的参数是颗粒尺度分布(PSD), 它的演变过程可由通用动力学方程(General Dynamic Equation, 简称 GDE)描述。对于单分散性颗粒的沉积, GDE 存在指数形式的理论解; 对于某些具有简单尺度分布(如初始 PSD 满足指数分布、对数正态分布或伽马分布等)和简单线性的沉积系数(或称为沉积核)的颗粒群沉积现象而言, GDE 也可理论求解^[5]。但是, 一方面这些理论解无法直接提供颗粒几何平均尺度、颗粒总数目、颗粒几何标准偏差(分散度)等关键信息; 另外, 对于多分散性颗粒群和非线性沉积核而言, 普通的数值方法, 如有限差分法、有限容积法等, 均难以数值求解 GDE。目前常见的 GDE 解法主要有矩方法^[5]、分区

法^[6]、离散法、离散分区法、Monte Carlo(MC)算法^[7-8]等几类, 各有其优缺点。MC 算法^[7]由于能得到颗粒的轨道经历效应和历史效应, 可以方便处理多组分、多分散性颗粒, 对于复杂的颗粒演变如不规则形状颗粒甚至已经沉积的颗粒的重新携带等均能处理, 算法相对较简单而易于编程实现, 可以无阻碍地处理具有复杂沉积核函数形式的沉积机理; 但是 MC 算法由于需要跟踪大量的模拟颗粒而计算代价较大, 而且考虑沉积的普通的常体积(Constant-Volume)MC 算法无法协调计算精度和计算代价之间的矛盾, 这是因为随着颗粒沉积事件的发生, 实际颗粒数目会不断减少, 普通 MC 算法中模拟颗粒数目 N 也会不断减少, 由于 MC 算法的计算精度与 \sqrt{N} 成反比, 这使得计算精度会不断降低; 普通 MC 算法为了保证相当的计算精度而不得不增多初始的模拟颗粒数目, 这进一步导致了 MC 算法计算代价的增大。随着计算机计算能力的增强和计算方法的改进, 这些缺点在逐渐得到解决。Matsoukas 等^[8]发展了一种常数数目(Constant-Number)MC 法, 在计算过程中保持模拟颗粒数目不变, 从而保证该 MC 算法具有稳定的计算精度, 但是该算法基于事件驱动(event-driven), 并且以不断收缩和扩张计算区域的体积为代价来保证计算区域内恒定的模拟颗粒数目, 因此难以进一步同时考虑颗粒的空间扩散、边界条件、颗粒场的动力学演变等, 也不便于具体

* 收稿日期: 2005-02-22; 修订日期: 2005-07-18.

基金项目: 国家自然科学基金(50325621)和国家重点基础研究专项经费(2002CB211602).

作者简介: 赵海波(1977), 男, 讲师, 博士研究生, 主要研究领域: 气固两相流和电厂自动化控制.

的工程应用和科学定量分析。本文试图提出了一种多重 Monte Carlo 算法 (Multi-Monte Carlo, 以下简称 MMC 算法) 来求解同时考虑颗粒沉积的 GDE, 使其具备较高的计算精度和较低的计算代价, 并能方便地应用于工程计算和科学定量分析。

1 考虑颗粒沉积的多重 Monte Carlo 算法

考虑颗粒沉积的通用动力学方程 (GDE) 为^[5]:

$$dn_p(v, t)/dt = -R(v, t)n_p(v, t) \quad (1)$$

其中, $n_p(v, t)$ 为颗粒尺度分布函数 (量纲为 $m^{-3} \cdot m^{-3}$), 表示时刻 t 、体积为 v 的颗粒组在单位体积内的数目浓度, $R(v, t)$ 称为沉积核或沉积系数, 描述单位时间内体积为 v 的颗粒可能沉积的概率 (量纲为 s^{-1}), 各种沉积机理可以在沉积核的模型中集中考虑。

1.1 考虑沉积的 MMC 算法的技术路线

当采用随机算法来描述颗粒沉积的动力学过程时, 颗粒群被视为一个服从统计学规律的整体, 时刻 t 、尺度为 v 的颗粒是否发生沉积事件服从一个概率, 即沉积核 $R(v, t)$ 。

MMC 算法的特点是引入加权虚拟颗粒的概念和同时具有时间驱动 MC、常数目 MC 和常体积 MC 的特点。首先, MMC 算法认为体积相同或相近的颗粒具有同样的属性和动力学行为, 这些实际颗粒能够被适当数目的虚拟颗粒所代表, 编号为 i 的虚拟颗粒被赋予数目权值 kwt_i (kwt_i 的物理意义是虚拟颗粒 i 所代表的实际颗粒的个数), 虚拟颗粒的演变过程可以代表这些实际颗粒的演变过程, MMC 算法跟踪虚拟颗粒的沉积过程。由于虚拟颗粒的总数目比实际颗粒总数目少得多, 故 MMC 算法的整体计算代价比普通 MC 算法要小得多。引入虚拟颗粒的详细步骤和示例参照文献[9]。

MMC 算法基于时间驱动, 认为在适当的时间步长 Δt 内, 颗粒之间的动力学事件可以互相解耦, 即可以独立处理每一个虚拟颗粒的沉积事件。考虑颗粒沉积的 MMC 算法的流程图如图 1。其中的关键步骤包括时间步长的计算、随机方法判断沉积事件的发生和随机方法处理沉积事件的后果。

1.2 时间步长的设置

对于基于时间驱动 (time driven) 的 MMC 算法的

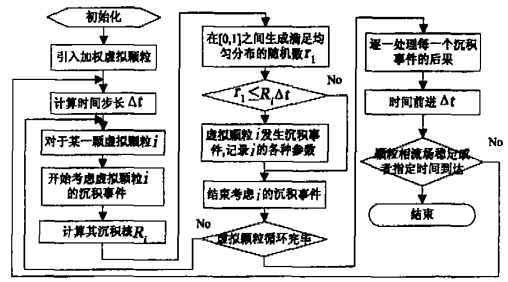


图 1 处理沉积事件的多重 Monte Carlo 算法流程图

Fig. 1 Flow chart of Multi-Monte Carlo method for deposition

时间步长的设置, 最重要的是保证在时间步长范围内, 任何颗粒都只可能发生最多一次沉积事件, 这样才不至于遗漏对该事件的处理。所以时间步长要小于等于计算区域内某一颗粒发生一次沉积事件的时间尺度中的最小值 (称为最小沉积时间), 时间步长是可调的。在某个控制容积 V 内, 假设有 N 个实际颗粒, 虚拟颗粒个数为 N_f , 那么最小沉积时间为:

$$t_{\text{depo, min}} = \frac{1}{\max_{i=1, \dots, N_f} (R_i)} \quad (2)$$

R_i 为控制容积 V 中颗粒 i 的沉积核, 表示单位时间内颗粒 i 发生一次沉积事件的概率。所以, 时间步长的限制条件可表达为 $\Delta t \leq t_{\text{depo, min}}$ 。

1.3 MMC 算法对沉积事件的处理

由算法流程图 1 可知, MMC 算法对沉积事件的处理包括颗粒是否沉积的判断以及沉积后果的处理。

虚拟颗粒 A (编号为 i) 是否发生沉积事件的判断表达式如下:

$$\begin{cases} r_1 \leq R_i \Delta t & \text{虚拟颗粒 } i \text{ 沉积} \\ r_1 > R_i \Delta t & \text{虚拟颗粒 } i \text{ 不沉积} \end{cases} \quad (3)$$

其中, r_1 为满足均匀分布、位于 $[0, 1]$ 的随机数。

颗粒沉积的直接后果是实际颗粒总数目的减少, 如果不进行处理, 虚拟颗粒数目也会相应减少。为了保持 Monte Carlo 算法的计算精度, 需要控制虚拟颗粒的数目。通过一个随机过程从虚拟颗粒数列中随机选取一颗虚拟颗粒 B, 其序号为 $\text{integer}[r_2 \times N_f + 1]$, $\text{integer}[\]$ 表示取整, r_2 为满足均匀分布、位于 $[0, 1]$ 的随机数。如果选择的虚拟颗粒就是已经判断出来将要沉积的虚拟颗粒 A, 则需要重新选择。此时, 把虚拟颗粒 B 分裂成两颗虚拟颗粒 C 和 D, $kwt_B = 2kwt_C = 2kwt_D$, 且 $v_B = v_C = v_D$, 其中 v_B 、 v_C 和 v_D 为相应的颗粒体积; 把虚拟颗粒 C 和 D 分别取代虚拟颗粒 A

和 B 在虚拟颗粒序列中的位置。这样的处理手段保持了虚拟颗粒总数目不变从而保证了 MC 算法计算精度的稳定。

2 算法验证及讨论

导致沉积的各种机制集中体现在沉积核的模型中,对于一般工况下的颗粒,重力作用和布朗扩散是最重要的干沉降机制。Park 等^[5]认为考虑重力作用和布朗扩散的沉积核可如下描述:

$$R(v, t) = R_b(v, t) + R_g(v, t) = Av^{-2(n-1)/3n} + Bv^{2/3} \quad (4)$$

其中, $R_b(v, t)$, $R_g(v, t)$ 分别为布朗扩散机制和重力作用机制所控制的沉积核:

$$R_b(v, t) = Av^{-2(n-1)/(3n)}, R_g(v, t) = Bv^{2/3},$$

$$A = \left[\frac{1.7N_k T}{6\pi\mu} \right]^{n-1/n} \left[\frac{nSs \sin(\pi/n)}{\pi V} \sqrt{k_e L_2} \right]^{2-n},$$

$$B = \frac{2\rho g}{9\mu H}, L_2 = \frac{L}{\sqrt{Re}} \quad (5)$$

其中, n 为由实验确定的一个适配系数,一般 $n = 2.5 \sim 2.8$; λ 为介质分子的平均自由程。 k_B 为 Boltzmann 常数, $k_B = 1.38054 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}$, T 为介质的绝对温度, μ 为介质动力学粘性系数, ρ 为颗粒材料密度, g 为重力加速度, H 为计算区域高度, V 为计算区域体积, S 为计算区域壁面面积总和, k_e 为湍流的扩散系数, L_2 为湍流边界层厚度, L 为流场的特征尺度, Re 为流体介质的雷诺数。在本文中,对于所有模拟工况,以上参数的设置如下: $n = 2.6$; $\lambda = 0.1 \mu\text{m}$; 计算区域长 \times 宽 \times 高 = $3\text{m} \times 5\text{m} \times 2.5\text{m}$; $T = 433.15\text{K}$; $L = 1\text{m}$; $k_e = 36\text{s}^{-1}$; $\rho = 2000\text{kg/m}^3$; $g = 9.782\text{m/s}^2$; $\mu = 3.14 \times 10^{-5}\text{kg/(m}\cdot\text{s)}$; $Re = 3000$ 。初始颗粒数密度为 $N_0 = 10^6 \text{ 1/m}^3$, 虚拟颗粒数目为 $N_f = 3000$ 。

Park 等经过分析认为^[5],对于粗大颗粒的沉积机制主要由重力作用所控制,布朗扩散对其影响甚微,此时可认为沉积核 $R(v, t) \approx R_g(v, t)$; 而细微颗粒的沉积主要受布朗扩散的影响,此时可认为沉积核 $R(v, t) \approx R_b(v, t)$; 中等尺度范围的颗粒的沉积机制则必须同时考虑重力作用和布朗扩散, $R(v, t) = R_b(v, t) + R_g(v, t)$ 。所谓的粗大颗粒、细微颗粒、中等尺度范围的颗粒为一相对概念,对于不同的计算工况,需要具体分析; 一般来说,如果 $R_b(v)/R_g(v) > 100$, 则可认为该体积为 v 的颗粒为细微颗粒; 如果 $R_b(v)/R_g(v) < 0.01$, 则可认为颗粒 v 为粗大颗粒;

如果 $0.01 \leq R_b(v)/R_g(v) \leq 100$, 则认为颗粒 v 为中等尺度范围的颗粒。当颗粒尺度的初始分布为对数正态分布时, Park 等利用矩方法、在适当简化的前提下,分别得到了粗大颗粒、细微颗粒和中等尺度范围颗粒的颗粒尺度分布函数的理论分析近似解^[5]。本文选取其作为 MMC 算法的检验标准。满足对数正态分布的颗粒尺度分布函数如下:

$$n_p(v, t) = \frac{1}{3v} \frac{N(t)}{\sqrt{2\pi\ln\sigma(t)}} \exp\left\{ -\frac{\ln^2[v/v_g(t)]}{18\ln^2\sigma(t)} \right\} \quad (6)$$

$\sigma(t)$ 为随时间变化的几何标准方差; $v_g(t)$ 为随时间变化的颗粒几何平均体积, $v_g(t) = 4\pi r_g(t)^3/3$, $r_g(t)$ 为随时间变化的颗粒几何平均半径; $N(t)$ 为颗粒总数目浓度。在对颗粒群进行离散化的过程中,按照对数分类法则把其分为 200 类颗粒,以每类颗粒的几何平均体积代表该类内所有颗粒的实际体积。另外,颗粒的沉积特征时间尺度定义为 $\tau_d = 1/R(v_g, 0)$ 。

2.1 重力作用下的粗大颗粒沉积

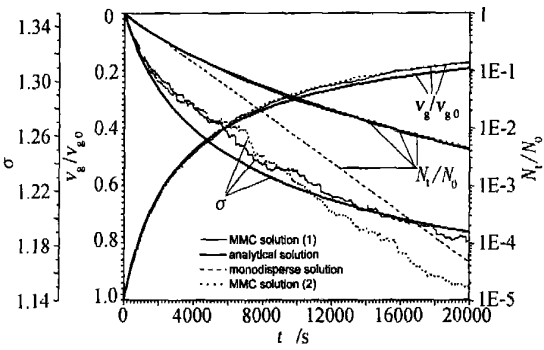
在初始时刻,选取 $r_{g0} = 3\mu\text{m}$, $\sigma_0 = 1.35$, 此时颗粒的直径范围大约为 $[1.80\mu\text{m}, 19.93\mu\text{m}]$, $R_b(v)/R_g(v)$ 的范围大约为 $[8.92 \times 10^{-6}, 2.08 \times 10^{-2}]$ 。此时特征沉积时间尺度 τ_d 为 2006.24s, 选取演变时间为 $10\tau_d$, 即 20062.4s。颗粒的总数密度、几何平均体积、几何标准方差与 Park 等的理论分析解^[5] 的比较如图 2(a) 所示, 图中“MMC solution (1)”为只考虑重力作用沉积机制时的 MMC 数值模拟结果,与理论分析解符合很好; 图中“MMC solution (2)”为同时考虑重力作用和布朗扩散沉积机制时的 MMC 数值模拟结果,由于 $R_b(v)/R_g(v)$ 的限制,与理论分析解以及只考虑重力作用沉积机制的“MMC solution (1)”基本符合,这表明 Park 等的简化处理是基本正确的。但随着时间往后推移,对于颗粒群的几何标准方差,“MMC solution (1)”与相应的理论分析解有一些误差,以更大的速率衰减到 1, 这表明颗粒群的粒径越来越均匀(“ $\sigma = 1$ ”表示粒径统一的单分散性颗粒群); 出现误差的原因是随着时间的推移,颗粒群中的粗大颗粒率先沉积下来,颗粒平均几何体积越来越小,但是对于剩下的那些较小颗粒,其 $R_b(v)/R_g(v)$ 仍然维持在定量纲(如 2.00×10^{-2} , 大于经验值 10^{-2}), 布朗扩散沉积机制不能完全忽略,存在对颗粒尺度分布的演变的影响; 这也一方面说明,对于颗粒尺度范围并不完全集

中于粗大颗粒范围内的工况, Park 的理论分析解并不完全适用。另外, 颗粒尺度分布为单分散性时颗粒总数密度的理论分析解为 $N(t)/N_0 = \exp[-R_g(v, t)t]$, 注意到, 当假设颗粒群内每个颗粒粒径 $r = r_{g0} = 3\mu\text{m}$ 时, 其结果“monodisperse solution”与 MMC 模拟结果和 Park 的理论分析解均有很大的误差, 特别是演变时间较长时。

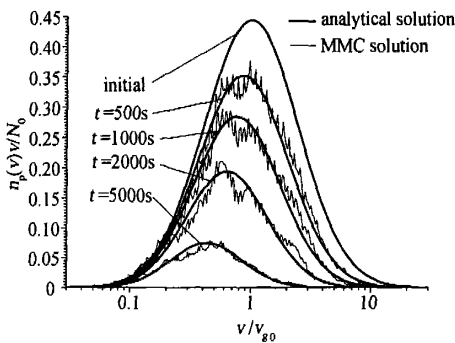
图 2(b) 为几个特定时刻的颗粒尺度分布曲线与理论分析解的比较, 两者符合较好。由图可知, 随着时间的推移, 尺度分布曲线往左下角推移, 且越来越平坦, 表明粗大颗粒逐渐沉降下来, 而其中相对较小的那些颗粒由于受重力作用影响较小而仍然存在, 颗粒群的几何平均体积变小, 颗粒之间体积差异也越来越小。

$R_g(v)$ 的范围大约为 [898.02, 2098517.73]。此时特征沉积时间尺度 τ_d 为 4159.36s, 仍然选取演变时间为 $10\tau_d$, 即 41593.56s。图 3(a) 为颗粒的总数密度、几何平均体积、几何标准方差与 Park 等的理论分析解的比较, 两者基本符合很好; 且由于 $R_b(v)/R_g(v)$ 保持在较高的量级, 同时考虑重力作用和布朗扩散沉积机制时的“MMC solution (2)”与“MMC solution (1)”差异并不明显。同样的, 假设颗粒尺度分布为单分散性时 ($r = r_{g0} = 0.01\mu\text{m}$) 的分析解“monodisperse solution”与 MMC 模拟结果和 Park 的理论分析解均有很大的误差。

在几个特定时刻, 布朗扩散机制下的颗粒尺度分布曲线与理论分析解的比较如图 3(b), 两者符合较好。随着时间的推移, 尺度分布曲线往右下角推移, 且越来越平坦, 表明细微颗粒逐渐沉降下来, 而布朗扩散机制对较大的颗粒影响要小一些, 仍然有较大颗粒存在, 颗粒群的几何平均体积变大, 颗粒之间体积差异也越来越小。



(a)



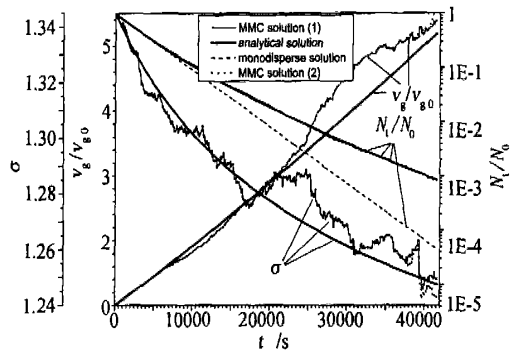
(b)

图 2 粗大颗粒沉积的 MMC 结果与理论分析解的比较

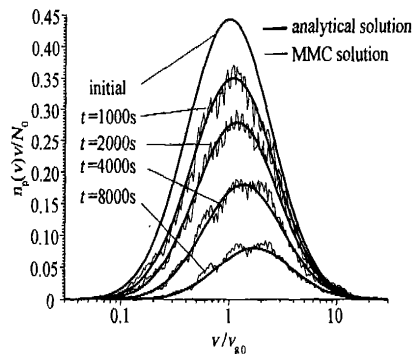
Fig.2 Comparison of changes in particle size distribution in the coarse particles size range

2.2 布朗扩散下的细微颗粒沉积

在初始时刻, 选取 $r_{g0} = 0.01\mu\text{m}$, $\sigma_0 = 1.35$, 此时颗粒的直径范围大约为 [6.02nm, 66.43nm], $R_b(v)/$



(a)



(b)

图 3 细微颗粒沉积的 MMC 结果与理论分析解的比较

Fig.3 Comparison of changes in particle size distribution in the fine particles size range

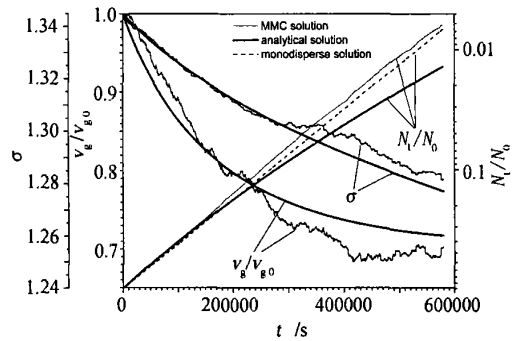
2.3 同时考虑重力作用和布朗扩散时的中等尺度颗粒沉积

在初始时刻, 选取 $r_{g0} = 0.3\mu\text{m}$, $\sigma_0 = 1.35$, 此时颗粒的直径范围大约为 $[0.18\mu\text{m}, 1.99\mu\text{m}]$, $R_b(v)/R_g(v)$ 的范围大约为 $[1.52 \times 10^{-2}, 35.45]$ 。此时特征沉积时间尺度 τ_d 为 115737.71s, 选取演变时间为 $5\tau_d$, 即 578688.55s。颗粒的总数密度、几何平均体积、几何标准方差与 Park 等的理论分析解的比较如图 4(a) 所示, 与上述两种工况不同的是, 颗粒总数密度的 MMC 模拟结果“MMC solution”与假设为单分散性时($r_g = r_{g0} = 0.3\mu\text{m}$)的分析解结果更为接近, 而与 Park 等的理论分析解^[5]有较大误差, 这是由于 Park 假设中等尺度颗粒的沉积是粗大颗粒沉积与细微颗粒沉积的叠加, 实际上, 重力作用和布朗扩散对中等尺度颗粒的沉积影响均明显存在, 体积较大的颗粒重力作用对其影响大一些, 较小的颗粒布朗扩散对其影响大一些, 两种机制互相制约, 总体表现就类似于单分散性颗粒的沉积。

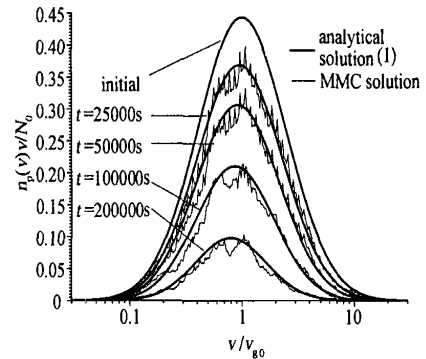
图 4(b) 为几个特定时刻的颗粒尺度分布曲线与理论分析解的比较。由图可知, 随着时间的推移, 尺度分布曲线越来越平坦, 但是并不明显地往体积较小或体积较大的方向偏移, 表明较大的颗粒和较小的颗粒均逐渐沉积下来, 颗粒之间体积差异越来越小。

以上对三个特殊工况的模拟验证了 MMC 算法的计算精度, 同时也反证了 Park 等对这三种特殊工况下理论分析解的可用性。以上三种工况下, MMC 算法的计算代价均在数十秒之内(计算环境为: Athlon Xp2500+, 512M, Visual Fortran 6.0, Windows Xp pro.), 可见 MMC 算法完全适合于一般的工程要求, 且具备相当的计算精度, 较好地解决了普通 Monte Carlo 算法计算精度和计算代价无法协调的矛盾。

注意到, 图 2(a) 中的颗粒几何标准方差的误差表明 Park 的理论分析解对于颗粒尺度范围同时跨越粗大颗粒和中等尺度颗粒时并不理想, 同样的道理, Park 的理论分析解对于颗粒尺度范围同时跨越中等尺度颗粒和细微颗粒、或者甚至同时跨越三类颗粒时的适用性也并不理想, MMC 则可以无阻碍的适用于所有工况下的沉积求解。进一步推而广之, 由于 MMC 算法不需要做任何假设, 也不需要限制颗粒初始尺度分布函数, 故可以用于描述任何尺度颗粒的沉积过程。



(a)



(b)

图 4 中等尺度颗粒沉积的 MMC 结果与理论分析解的比较

Fig. 4 Comparison of changes in particle size distribution in the intermediate particles size range

3 结 论

为了求解考虑多分散性颗粒沉积的通用动力学方程(GDE), 本文发展了一种多重 Monte Carlo (MMC) 算法, 该算法通过跟踪比实际颗粒数目少得多的虚拟颗粒来描述颗粒尺度分布函数随时间的演变, 基于时间驱动, 模拟过程保持虚拟颗粒数目不变和计算区域体积不变。数值模拟结果与理论分析解的比较表明该算法较好地解决了普通 Monte Carlo 算法计算精度和计算代价无法协调的矛盾。

对于初始时刻为对数正态分布的多分散性颗粒, Park 等的理论分析解只适合于颗粒尺度范围完全位于粗大颗粒范围、或者细微颗粒范围或者中等尺度颗粒范围时颗粒沉积的描述, 而不适合于颗粒尺度范围跨域分布的工况, 而 MMC 算法可以较为准确地描述任何颗粒初始尺度分布函数、任何沉积机制时的多分散性颗粒群的沉积过程, 它可以作为其他数值解法的一个验证标准, 或应用于工程计算和一般科学定量分析。

参 考 文 献:

- [1] CORNER J, PENDLEBURY E D. The coagulation and deposition of a stirred aerosol [J]. *Proceedings of the Physics Society B*, 1951, 64(8): 645-654.
- [2] SEINFELD J H, PANDIS S N. Atmospheric chemistry and physics [M]. New York, USA: Wiley, 1998.
- [3] 周浩生, 罗惕乾, 高良润. 静电喷粉沉积速度场理论研究 [J]. 农业机械学报, 1998, 29(4): 55-60(ZHOU HAOSHENG, LUO TIQIAN, GAO LIANGRUN. The theory of deposition velocity in electrostatic dusting [J]. *Transact of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 1998, 29(4): 55-60).
- [4] ROSNER D E, TASSOPOULOS M. Deposition rates from polydispersed particle populations of arbitrary spread [J]. *AIChE Journal*, 1989, 35(9): 1497-1508.
- [5] 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.
- [6] KOURTI N, SCHATZ A. Solution of the general dynamic equation (GDE) for multicomponent aerosols [J]. *Journal of Aerosol Science*, 1998, 29(1): 41-55.
- [7] MAISELS A, KRUIS F E, FISSAN H. Direct simulation Monte Carlo for simultaneous nucleation, coagulation, and surface growth in dispersed systems [J]. *Chemical Engineering Science*, 2004, 59(11): 2231-2239.
- [8] LIN Y, LEE K, MATSOUKAS T. Solution of the population balance equation using constant-number Monte Carlo [J]. *Chemical Engineering Science*, 2002, 57(12): 2241-2252.
- [9] ZHAO H B, ZHENG C G, XU M H. Multi-Monte Carlo Method for Coagulation and Condensation/Evaporation in Dispersed Systems [J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2005, 286(1): 195-208.

A stochastic algorithm for the dynamic evolution process by particle deposition

ZHAO Hai-bo, ZHENG Chu-guang

(State Key Lab. of Coal Combustion, Huazhong Univ. of Sci. and Tech., Wuhan, Hubei 430074, China)

Abstract: In order to assort with antinomy of computation cost and computation precision in ordinary Monte Carlo methods, multi-Monte Carlo (MMC) method is promoted to simulate general dynamics equation (GDE) for deposition of polydisperse particles. MMC method introduces the concept of "weighted fictitious particle" on the base of the time-driven technique. MMC method conserves constant number of fictitious particles and constant volume with the evolution of time. Firstly MMC method is described in details, including the setting of time step, the judgment of the occurrence of deposition event, and consequential treatment of particle deposition event. Then MMC method is used to simulate three kinds of special cases in which analytical solutions exist; The simulation result of MMC method for GDE agrees with analytical solution well, which shows that MMC method has high computation precision. Furthermore MMC method also exhibits low computation cost.

Key words: general dynamics equation; Monte Carlo method; deposition; particle; polydisperse