

# 凝并和冷凝 蒸发对颗粒尺度分布的影响

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: 利用多重 Monte Carlo 算法对 13 种典型工况进行数值模拟, 考察不同类型的凝并核和冷凝/蒸发核对多分散性颗粒尺度分布时间演变的影响。发现常凝并核要比线性和二次方凝并核对小颗粒的影响大一些、对大颗粒的影响小一些, 线性和二次方凝并核对颗粒尺度分布的时间演变影响则取决于具体情况; 常冷凝核要比线性冷凝核对小颗粒的影响大一些、对大颗粒的影响小一些; 连续区布朗凝并核类似于常凝并核; 扩散冷凝核和颗粒尺度分布的影响介于常冷凝核和线性冷凝核之间。

关键词: 多重 Monte Carlo 算法; 凝并; 冷凝/蒸发; 通用动力学方程; 多分散性颗粒

中图分类号: TK 12; O 359 文献标识码: A 文章编号: 1005-9954(2006)06-0021-05

## Influence of different coagulation kernel and condensation/evaporation kernel on particle size distribution

ZHAO Hai-bo, ZHENG Chu-guang

(State Key Lab of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074 Hubei Province, China)

**Abstract** Multi-Monte Carlo method was used in the numerical simulation of 13 kinds of typical computational cases in order to investigate the influence of different coagulation kernel and condensation/evaporation kernel on the time evolution of particle size distribution (PSD). Numerical results show that constant coagulation kernel has more influences on small particles than linear and quadratic coagulation kernel whereas has less influences on big particles than linear and quadratic coagulation kernel; in the same way, constant condensation kernel has more influences on small particles and less influences on big particles than linear condensation kernel. Brownian coagulation kernel in the continuum regime is weakly size-dependent, similar to constant coagulation kernel; the degree of influence on particle size distribution of diffusive condensation kernel is within the scope of that of constant and linear condensation kernel.

**Key words** Multi-Monte Carlo method; coagulation; condensation/evaporation; general dynamics equation; polydisperse particles

自然界和工程中广泛存在着颗粒物的凝并和冷凝/蒸发现象, 由于离散系统中颗粒的凝并和冷凝/蒸发等动力学事件所导致的颗粒尺度分布 (PSD) 的时间演变一直是研究重点和研究关键之一。通用动力学方程 (GDE) 用于描述 PSD 的演变过程, 考虑凝并和冷凝/蒸发的 GDE 如下:

$$\frac{dn_p(V_1, t)}{dt} = \left\{ \frac{1}{2} \int_{V_{\min}}^{V_1} \beta(V_1 - V_2, V_2, t) n_p(V_1 - V_2, t) n_p(V_2, t) dV_2 - n_p(V_1, t) \cdot \int_{V_1}^{V_{\max}} \beta(V_1, V_2, t) n_p(V_2, t) dV_2 \right\}_{凝并} - \left\{ \frac{\partial [I(V_1, t) n_p(V_1, t)]}{\partial V_1} \right\}_{冷凝/蒸发} \quad (1)$$

其中  $n_p(V, t)$  为颗粒尺度分布函数 (量纲为  $\text{个} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{m}^{-3}$ ), 表示时刻  $t$  体积  $V_1$  的颗粒在单位体积内的颗粒浓度;  $\beta(V_1, V_2, t)$  是  $t$  时刻、体积  $V_1$  和  $V_2$  的 2 颗粒的凝并核 (量纲为  $\text{m}^3 \cdot \text{个}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ), 表示单位时间内 2 颗粒发生一次凝并的概率;  $I(V_1, t)$  为冷凝/蒸发核 (量纲为  $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ ), 表示  $t$  时刻颗粒的

基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (90410017); 国家重点基础研究专项经费 (2002CB211602)

作者简介: 赵海波 (1977-), 男, 博士生, 讲师, 主要研究方向为多相流数值模拟, E-mail: klnsanzh@163.com

体积变化率。本文认为凝并核和冷凝/蒸发核不随时间变化。

不同类型的凝并核和冷凝/蒸发核对于 PSD 的时间演变有着不同的影响规律,特别是当几种事件同时主导 PSD 的时候,其规律性往往难以直观发现。本文利用作者提出的多重 Monte Carlo 算法<sup>[1]</sup>对几种典型工况进行了数值模拟,利用数值模拟结果分析不同类型的凝并核和冷凝/蒸发核对 PSD 的影响。

### 1 多重 Monte Carlo 算法的数值模拟

对于凝并核而言,可以认为  $K_0 \leq \beta(V_2, V_1) \leq K_0(V_2 + V_1)$  或  $K_0 V_2 V_1$ ,  $K_0$  为常数;  $\beta(V_2, V_1) = K_0$  可视为布朗凝并的一种极端情形;  $\beta(V_2, V_1) = K_0(V_2 + V_1)$  通常可用于近似描述湍流重力机制下的扩散凝并行为;  $\beta(V_2, V_1) = K_0 V_2 V_1$  可描述“凝胶化”,是一种极限情形。对于冷凝/蒸发核而言,可以认为  $\sigma \leq I(V_1) \leq \sigma V_1$ ,  $\sigma$  为常数,  $I(V_1) = \sigma$  表示冷凝/蒸发行为与颗粒的体积无关,是一种极端情形;当靠近颗粒的表面发生化学反应时  $I(V_1) = \sigma V_1$ ;自然界中实际存在的冷凝/蒸发核一般为  $I(V_1) = \sigma V_1^{1/3}$ ,表明冷凝/蒸发的强度取决于颗粒的粒径而非体积。

本文采用文献 [2] 中的计算条件。初始时刻 PSD 满足指数分布:

$$n_p(V_1, 0) = N_0 e^{-V_1/V_{1g0}} / V_{1g0} \quad (2)$$

其中  $N_0$  和  $V_{1g0}$  分别为初始颗粒总数目和初始颗粒几何平均体积,选择  $N_0 = 10^6 \text{ 个} \cdot \text{cm}^{-3}$ ,  $V_{1g0} = 0.027 \mu\text{m}^3$ 。

为了考察凝并和冷凝对于 PSD 的不同影响规律,分别单独考虑或者组合考虑凝并核和冷凝核的存在的几种极限工况或普通工况。

工况 1 纯常凝并核,  $\beta(V_2, V_1) = K_0$ ; 工况 2 纯线性凝并核,  $\beta(V_2, V_1) = K_0(V_2 + V_1)$ ; 工况 3 纯二次方凝并核,  $\beta(V_2, V_1) = K_0 V_2 V_1$ ; 工况 4 纯连续区布朗凝并核<sup>[3]</sup>,  $\beta(V_2, V_1) = 2k_B T [2 + (V_2/V_1)^{1/3} + (V_1/V_2)^{1/3}] / (3\mu) = K_0 [2 + (V_2/V_1)^{1/3} + (V_1/V_2)^{1/3}] / 4$ ; 工况 5 纯常冷凝核,  $I(V_1) = \sigma$ ; 工况 6 纯线性冷凝核,  $I(V_1) = \sigma V_1$ ; 工况 7 纯扩散冷凝核,  $I(V_1) = \sigma V_1^{1/3}$ ; 工况 8 常凝并核和常冷凝核,  $\beta(V_2, V_1) = K_0, I(V_1) = \sigma$ ; 工况 9 常凝并核和线性冷凝核,  $\beta(V_2, V_1) = K_0, I(V_1) = \sigma$ ; 工况 10 线性凝并核和线性冷凝核,  $\beta(V_2, V_1) = K_0(V_2 + V_1), I(V_1) = \sigma V_1$ ; 工况 11 线性凝并核和常冷凝核,  $\beta(V_2, V_1) = K_0(V_2 + V_1), I(V_1) = \sigma$ ; 工况 12 二次方凝并核和常冷凝核,  $\beta(V_2, V_1) = K_0 V_2 V_1, I(V_1) = \sigma$ ; 工况 13 二次方凝并核和线性冷凝核,  $\beta(V_2, V_1) = K_0 V_2 V_1, I(V_1) = \sigma V_1$ 。

其中  $K_0$  为常数,  $k_B$  为波尔兹曼常数,  $k_B = 1.38054 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}$ ,  $T$  为介质温度,  $\mu$  为气体(或液体)介质的动力学粘性系数。

对于不同工况,均可定义特征凝并时间尺度  $\tau_c$ 、特征冷凝时间尺度  $\tau_d$ ,两时间尺度的比例  $\Omega$  为了同时考虑凝并和冷凝事件,选择合适的  $K_0$  和  $\sigma$ ,使得  $\Omega$  接近 1,这样凝并和冷凝事件均将对 PSD 的演变起主要作用。表 1 列举了不同工况的计算条件<sup>[2]</sup>。

表 1 13种工况的计算条件

Table 1 Computational condition of thirteen kinds of cases

工况	$\tau_c$	$\tau_d$	$\Omega (= \tau_c / \tau_d)$	$K_0$	$\sigma$	时间演变长度
1	$2/(K_0 N_0)$	$\infty$	0	$6.405 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 / \text{s}$	0	$\tau_c / 2$
2	$1/(K_0 N_0 V_{1g0})$	$\infty$	0	$1.115 \times 10^{-8} \text{ cm}^3 / (\mu\text{m}^3 \cdot \text{s})$	0	$\tau_c / 2$
3	$1/(K_0 N_0 V_{1g0}^2)$	$\infty$	0	$3.808 \times 10^{-7} \text{ cm}^3 / (\mu\text{m}^6 \cdot \text{s})$	0	$\tau_c / 2$
4	$2/(K_0 N_0)$	$\infty$	0	$6.405 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 / \text{s}$	0	$\tau_c / 2$
5	$\infty$	$V_{1g0} / \sigma$	$\infty$	0	$9.2 \times 10^{-6} \mu\text{m}^3 / \text{s}$	$\tau_d / 2$
6	$\infty$	$1 / \sigma$	$\infty$	0	$3.202 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	$\tau_d / 2$
7	$\infty$	$V_{1g0}^{2/3} / \sigma$	$\infty$	0	$3.0 \times 10^{-5} \mu\text{m}^2 / \text{s}$	$\tau_d / 2$
8	$2/(K_0 N_0)$	$V_{1g0} / \sigma$	$2\sigma / (K_0 N_0 V_{1g0})$	$6.405 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 / \text{s}$	$9.2 \times 10^{-6} \mu\text{m}^3 / \text{s}$	$\tau_c / 2$
9	$2/(K_0 N_0)$	$1 / \sigma$	$2\sigma / (K_0 N_0)$	$6.405 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 / \text{s}$	$3.202 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	$\tau_c / 2$
10	$1/(K_0 N_0 V_{1g0})$	$1 / \sigma$	$\sigma / (K_0 N_0 V_{1g0})$	$1.115 \times 10^{-8} \text{ cm}^3 / (\mu\text{m}^3 \cdot \text{s})$	$3.202 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	$\tau_c / 2$
11	$1/(K_0 N_0 V_{1g0})$	$V_{1g0} / \sigma$	$\sigma / (K_0 N_0 V_{1g0}^2)$	$1.115 \times 10^{-8} \text{ cm}^3 / (\mu\text{m}^3 \cdot \text{s})$	$9.2 \times 10^{-6} \mu\text{m}^3 / \text{s}$	$\tau_c / 2$
12	$1/(K_0 N_0 V_{1g0}^2)$	$V_{1g0} / \sigma$	$\sigma / (K_0 N_0 V_{1g0}^3)$	$3.808 \times 10^{-7} \text{ cm}^3 / (\mu\text{m}^6 \cdot \text{s})$	$9.2 \times 10^{-6} \mu\text{m}^3 / \text{s}$	$\tau_c / 2$
13	$1/(K_0 N_0 V_{1g0}^2)$	$1 / \sigma$	$\sigma / (K_0 N_0 V_{1g0}^3)$	$3.808 \times 10^{-7} \text{ cm}^3 / (\mu\text{m}^6 \cdot \text{s})$	$3.202 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	$\tau_c / 2$

MMC算法对工况 1—13的数值模拟结果与相应理论分析解<sup>[3-4]</sup>的比较见图 1—3,图中横坐标为颗粒体积  $V_1$ , 纵坐标为颗粒的体积密度  $n_p(V_1, t) \times$

$V_1$ , 表示单位体积内体积为  $V_1$  的颗粒群的总体积。模拟结果与理论分析解的良好符合证明 MMC算法的高计算精度。

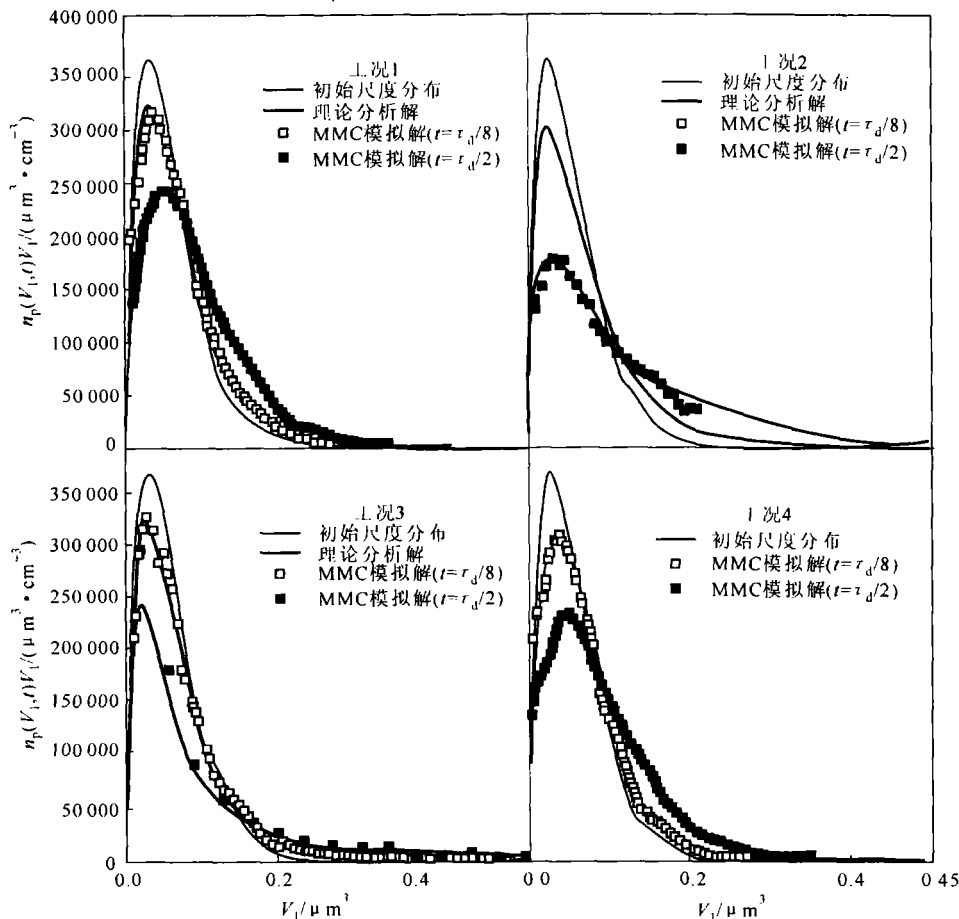


图 1 纯凝并工况

Fig 1 Pure coagulation case

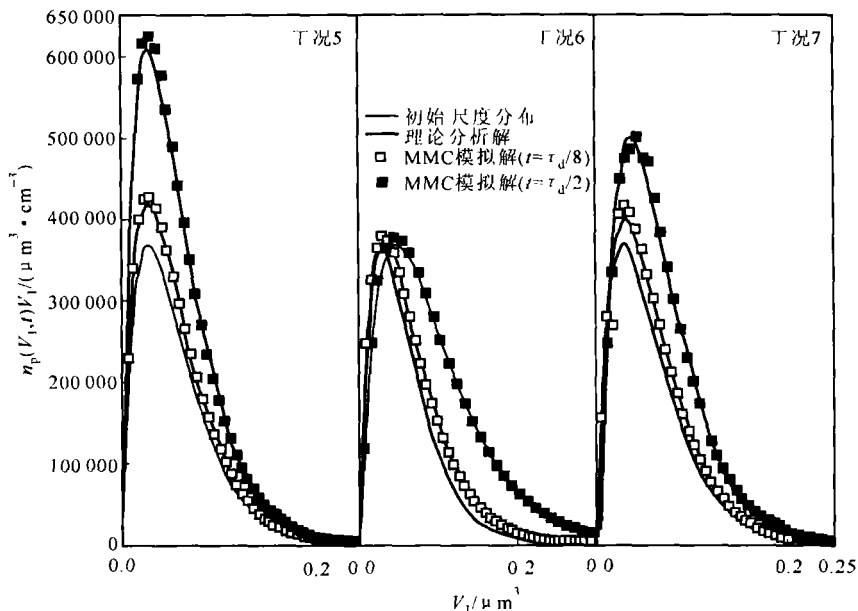


图 2 纯冷凝/蒸发工况

Fig 2 Pure condensation/evaporation case

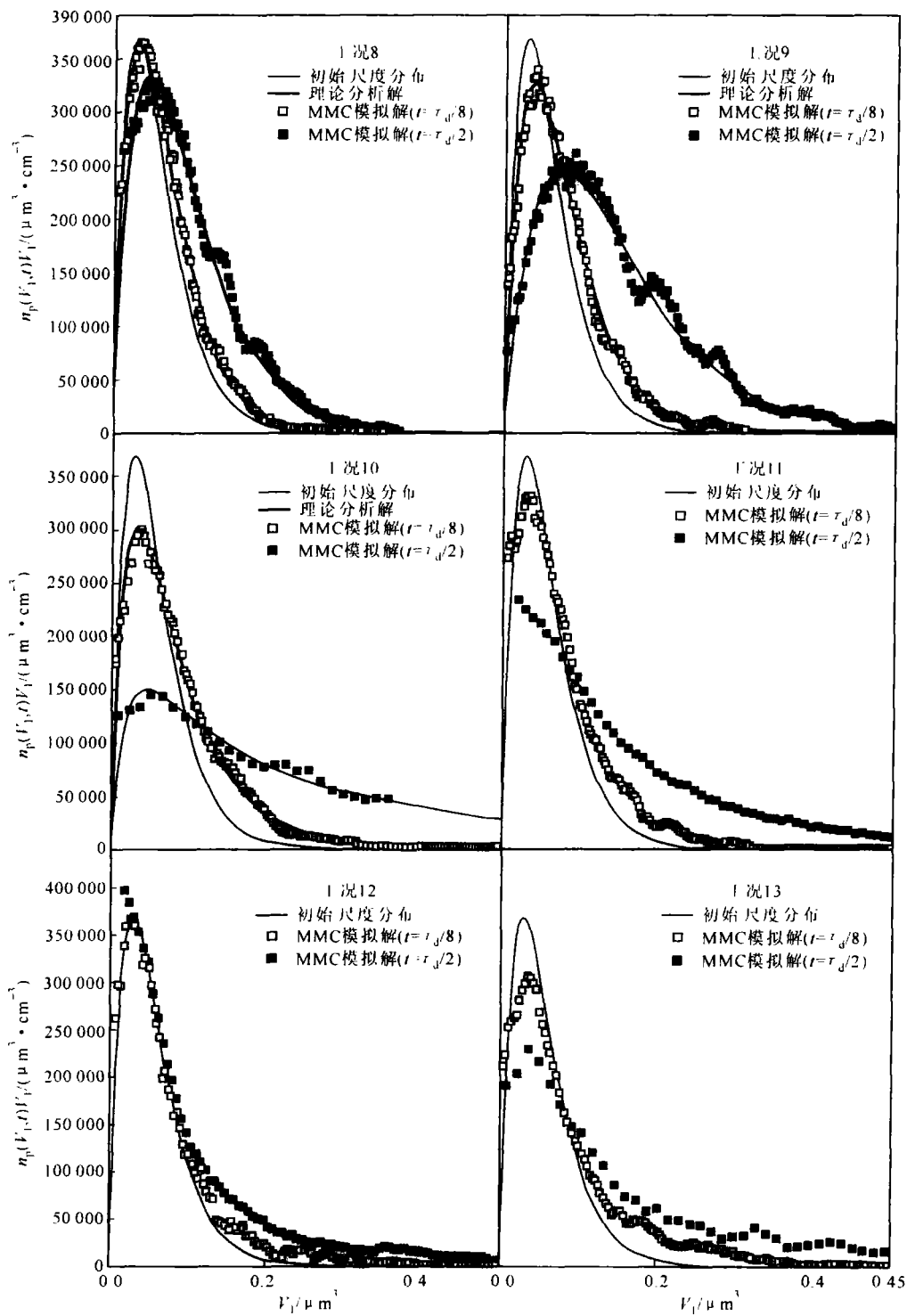


图 3 同时发生的凝并和冷凝工况

Fig. 3 Simultaneous coagulation and condensation case

### 2 分析讨论

首先考察纯凝并核工况时不同类型凝并核对 PSD 的影响。在同样计算初始条件和演变时间下, 比较工况 1(常凝并核)、工况 2(线性凝并核)和工况 3(二次方凝并核)以及工况 4(连续区布朗凝并

核)的 PSD 曲线(图 1)。显然, 相比较于常凝并核工况和布朗凝并核工况下的 PSD 曲线, 线性凝并核工况和二次方凝并核工况下的 PSD 曲线的峰值更低, 峰的位置更靠近纵坐标(更小的颗粒附近), 也就是说, 在更小的颗粒附近, 它们的 PSD 曲线更接

近初始 PSD 曲线,而在更大颗粒附近,它们的 PSD 曲线更远离初始 PSD 曲线,这表明它们对大颗粒的影响大一些,且颗粒尺度范围会随着时间演化而不断扩展;对小颗粒的影响小一些,且小颗粒不会完全消失;通常情况下二次方凝并核对小颗粒的影响小于线性凝并核对小颗粒的影响。常凝并核将导致小颗粒的逐渐消亡。常凝并核工况和布朗凝并核工况下的 PSD 曲线基本相似,表明布朗凝并核与颗粒体积相关性很小。然后考察同时发生凝并和冷凝、冷凝 蒸发事件对 PSD 的影响方式相同时,不同类型的凝并核和常凝并核对 PSD 的影响规律。比较工况 8(常凝并核和常冷凝核)、工况 11(线性凝并核和常冷凝核)、工况 12(二次方凝并核和常冷凝核)中 PSD 曲线(图 3),可发现,当冷凝事件对于颗粒的影响程度相同时(这 3 种工况均为常冷凝核),与纯凝并核工况下所得结论相同:线性凝并核和二次方凝并核对于大颗粒的影响要比常凝并核对于大颗粒的影响要大一些、对小颗粒的影响小一些。比较工况 9(常凝并核和线性冷凝核)、工况 10(线性凝并核和线性冷凝核)、工况 13(二次方凝并核和线性冷凝核)这 3 种均存在线性冷凝核工况中的 PSD 演变(图 3),可以发现同样的规律。

同样可以分析不同类型冷凝 蒸发核对于 PSD 的影响规律,首先考察纯冷凝核工况时的规律。比较工况 5(常冷凝核)、工况 6(线性冷凝核)和工况 7(扩散冷凝核)的 PSD 曲线(图 2),可以发现线性冷凝核依次比扩散冷凝核和常冷凝核对于大颗粒的影响大一些,对小颗粒的影响小一些,这是由于线性冷凝核对于小颗粒的影响随着粒径减少而更弱,此时小颗粒依然能够存在,而常凝并核情况下,小颗粒将逐渐消亡。扩散冷凝核工况和常冷凝核工况下的 PSD 曲线相关性较大。然后考察同时发生凝并和冷凝、凝并核类型相同时,不同类型的冷凝核对于 PSD 的影响规律。对于工况 8(常凝并核和常冷凝核)和工况 9(常凝并核和线性冷凝核),可发现,当凝并事件对于颗粒的影响程度相同的情况下(均为常凝并核),

线性冷凝核对于大颗粒的影响大一些,对小颗粒的影响小一些。从工况 11(线性凝并核和常冷凝核)和工况 10(线性凝并核和线性冷凝核)(2 种工况中均为线性凝并核)、工况 12(二次方凝并核和常冷凝核)和工况 13(二次方凝并核和线性冷凝核)(2 种工况中均为二次方凝并核)下经历时间演变的 PSD 曲线的比较可得到纯冷凝核工况时同样的结论。

### 3 结论

利用 MMC 算法研究了不同类型的凝并核和冷凝核对于颗粒尺度分布(PSD)时间演变的影响规律。对于纯凝并核工况或纯冷凝核工况和发生的凝并和冷凝 蒸发的工况,均存在如下规律:线性凝并核和二次方凝并核对于大颗粒的影响要比常凝并核大一些,而对小颗粒的影响小于常凝并核;线性冷凝核对于大颗粒的影响比常冷凝核大一些,对小颗粒的影响比常冷凝核小一些;连续区布朗凝并核与颗粒尺度相关性较小;扩散冷凝核对于 PSD 的影响介于常冷凝核和线性冷凝核之间。本文所有数值模拟都假定初始 PSD 为指数分布,但对于自然和工业中其他复杂的分布,上述规律依然成立。

### 参考文献:

- [1] 赵海波,郑楚光,柳朝晖,等. 处理多分散颗粒凝并和冷凝 蒸发问题的多重 Monte Carlo 算法 [J]. 化工学报, 2005, 56(5): 796—801.
- [2] Debry E, Sportisse B, Jourdain B. A stochastic approach for the numerical simulation of the general dynamics equation for aerosols [J]. Journal of Computational Physics, 2003, 184(2): 649—669.
- [3] Ramabhadran T E, Peterson T W, Seinfeld J H. Dynamics of aerosol coagulation and condensation [J]. AIChE J, 1976, 22(5): 840—851.
- [4] Park S H, Lee K W, Shimada M, et al. An alternative analytical solution to condensational growth of polydisperse aerosols in the continuum regime [J]. Journal of Aerosol Science, 2001, 32(2): 187—197.