文章编号:1001-246X(2013)01-0089-09

# 模拟颗粒凝并过程的快速 Monte Carlo 方法

## 徐祖伟 , 赵海波 , 刘 昕 , 郑楚光

(华中科技大学煤燃烧国家重点实验室,武汉 430074)

摘 要: 对常规异权值 Monte Carlo(MC)方法进行改进,基于强核函数思想,通过颗粒群单重遍历即可求得强核函数最大值,采用接受 – 拒绝法随机搜寻凝并对,并利用搜寻过程中拒绝和接受的所有凝并对的信息来估计凝并事件的等待时间(时间步长),从而避免颗粒群的双重遍历,以提高 MC 的效率.对典型工况的模拟结果显示该快速方法计算代价仅为 O(N<sub>s</sub>),能够显著提高计算效率,同时保持足够的计算精度,较好地协调计算代价与计算精度之间的矛盾.

关键词:颗粒群平衡模拟;凝并动力学;Monte Carlo 方法;异数目权值;粒颗粒尺度分布 中图分类号:0211.62;0359 文献标识码:A

0 引言

颗粒凝并(或称为团聚、聚并等)是指两颗颗粒碰撞接触并粘结在一起形成一颗尺度更大的颗粒,新生 颗粒的体积是两颗粒体积之和.颗粒凝并现象在自然界和工程技术领域广泛存在,如大气环境气溶胶的变 迁、燃烧源可吸入颗粒物的演变、化工过程中的造粒、纳米颗粒的合成等.其物理过程是:颗粒流体系统中大 量离散的颗粒,在介质剪切流动、布朗运动、静电力、热泳力等因素作用下,颗粒间产生相对运动,彼此接触及 粘附,导致颗粒总数减小,颗粒平均尺度增大,即颗粒的尺度分布(PSD)随时间变化.表征这一动力过程的控 制方程被称为颗粒群平衡方程(PBE),其具有广泛适应性.基于颗粒稀疏和分子混沌假设,描述颗粒凝并的 PBE 如下<sup>[1]</sup>:

$$\frac{\partial n(v t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_{v_{\min}}^{v} \beta(v - u \mu t) n(v - u t) n(u t) du - n(v t) \int_{v_{\min}}^{v_{\max}} \beta(v \mu t) n(u t) du , \qquad (1)$$

其中  $\mu v v$  表示两颗粒的尺度大小,量纲为 m<sup>3</sup>;  $n(v_t)$  为颗粒尺度分布函数,量纲为 m<sup>-3</sup>·m<sup>-3</sup>;  $n(v_t)$  dv 表示 时刻  $t_v$ 在尺度范围  $v \sim (v + dv)$  内的颗粒数浓度;  $\beta(v_u, t)$  是时刻  $t_v$ 尺度分别为 v 和 u 的两颗粒凝并核函 数,表示单位时间内两颗粒发生一次凝并事件的概率.方程(1) 右边第一项为新颗粒生成率,表示尺度为 u(u < v) 的颗粒与尺度为(v - u) 的颗粒凝并生成尺度为 v 的新颗粒的速率; 右边第二项为颗粒消失率,表示 尺度为 v 的颗粒与其他任一尺度的颗粒发生凝并导致原颗粒消失的速率.

PBE 是一个部分积分微分的非线性方程,仅对某些特殊工况存在解析解,且其数值求解也比较困难,目前颗粒群平衡模拟(PBM)可用的数值方法主要有矩方法、分区法、Monte Carlo(MC)方法等,这些方法都或多 或少地存在适用范围受限、计算代价与精度难以协调等矛盾.MC 方法也称随机模拟法,能够有效求解各种 高维和复杂几何系统内的粒子输运问题,曾广泛应用于核科学及相关领域<sup>[2]</sup>.对于颗粒群平衡问题,MC 方 法基于 PBE 的真实解与无限随机抽样统计解的等价性,通过从系统中大量的有限随机抽样获得 PBE 的近似 解,其优点是能够得到颗粒轨迹经历效应和历史效应,便于处理多维多变量问题,模拟过程相对简单,易于编 程实现<sup>[3]</sup>.

目前,颗粒群平衡模拟的 MC 方法可以划分为如下几大类:按照时间窗口的离散方案可以分为事件驱动

收稿日期: 2012-04-13; 修回日期: 2012-08-06

基金项目: 国家自然科学基金(50876037)、教育部新世纪优秀人才支持计划(NCET-09-0395)和多相复杂系统国家重点实验室开放课题 (MPCS-2011-D-02)资助项目

作者简介: 徐祖伟(1986 -) ,男 ,河南 ,主要从事多相流热物理研究 ,E-mail: xu\_zuwei@163.com

通讯作者: 赵海波(1977 – ) ,男 ,湖南宁乡 ,教授 ,博士 ,从事多相流系统的实验、模型及模拟研究 ,E-mail:klinsmannzhb@163.com

MC<sup>[4]</sup>和时间驱动 MC<sup>[5]</sup>,按照模拟颗粒数目和计算区域体积的调节方式可以分为常体积法<sup>[4]</sup>和常数目 法<sup>[6]</sup>,按照模拟颗粒数目权值的分配方法可以分为等权值法和异权值法<sup>[7]</sup>.等权值法是从实际的颗粒群系 统中取样一个子系统,子系统内所有模拟颗粒具有均等的数目权值,每个模拟颗粒代表了一定同等数量的实 际颗粒.等权值法难以完整地继承实际颗粒群的尺度分布(如数密度稀疏区间),导致颗粒尺度分布函数细 节信息的丢失.为了克服这方面的缺陷,作者提出并发展了异权值方法<sup>[8-9]</sup>,采用数目权值不等的模拟颗粒 群代表实际颗粒群,尽可能多地继承多分散颗粒群的尺度分布信息,不仅可以采用事件驱动模式<sup>[7]</sup>,还可以 采用时间驱动模式<sup>[10]</sup>,而且能够在计算过程中保持常数目和常体积,能很好地克服等权值方法的缺点.

但是,MC方法普遍面临的问题是模拟颗粒数目较多时计算代价较大(对于颗粒凝并事件的模拟,计算 代价为O(N<sup>2</sup><sub>\*</sub>) 其中N<sub>\*</sub>为模拟颗粒数目) 模拟颗粒数目较少时随机误差较大(统计精度与N<sup>1/2</sup>成正比) 存 在着计算代价和计算精度难以协调的矛盾.目前提高 MC 计算速度的方法大致可以分为两类:①从并行计算 的角度着手,以较多的计算资源换取计算时间的缩短,包括基于 MPI 的多机集群(MPI-Cluster)并行技术,基 于 OpenMP 的多核心并行技术以及最近发展起来的基于 OpenCL/CUDA 的 GPU 众核心并行技术等<sup>[11]</sup>;②从 改进 MC 方法本身入手,降低运算次数且不明显损失计算精度.如 Kruis等<sup>[12]</sup>发展了一种更新颗粒群信息的 智能簿记技术(Smart bookkeeping technology);Eibeck 和 Wagner<sup>[13-14]</sup>提出了一种基于强核函数(Majorant kernel)和虚拟步进 Markov 过程的 MC,在处理凝并事件时避免双重遍历,具有很高的计算效率;Irizarry<sup>[15-16]</sup> 基于化学反应动力学的思想构建了拟反应组分及随机反应路径的步进 Markov 模型,跟踪模拟颗粒类而非离 散模拟颗粒,显著提高了计算速度;Lécot等<sup>[11]</sup>采用均匀分布的随机矢量代替随机数,改进变量的随机抽样 策略,降低了误差而且提高了计算速度;Lécot等<sup>[11]</sup>采用均匀分布的随机矢量代替随机数,改进变量的随机抽样 策略,降低了误差而且提高了计算效率.李树等<sup>[18]</sup>针对 ICF 聚变靶中子输运问题的特点,发展一种"加权赌 分裂抽样方法",以增加重要区域的抽样数、减少非重要区域的抽样数,同时通过权修正保证计算结果无偏, 使超高能中子通量计算误差显著降低,达到提高超高能中子计算效率的目的.这些方法均或多或少增进了 MC 的计算效率,但是大都以复杂的数值算法构造为代价,或者计算精度相对降低,适用范围受到局限,这在 一定程度上抵消了 MC 方法的优点.

本文基于作者提出的异权值方法(Differentially weighted Monte Carlo, DWMC)<sup>[19]</sup>,从改进 MC 方法的角 度提出一种求解颗粒凝并问题的快速方法(Fast-DWMC),试图仅仅花费单重遍历颗粒群的计算代价就完成 一个时间步的模拟,基本思路是:基于强核函数思想,单重遍历估计出所有异权值凝并对的最大凝并概率,采 用接受 - 拒绝方法选择凝并对,并根据接受 - 拒绝过程随机抽样得到的颗粒对的凝并概率估计等待时间 (时间步长).与常规 DWMC (Normal-DWMC)方法精确计算时间步长相比,Fast-DWMC 虽然通过随机抽样适 当的颗粒群参数来估计时间步长,但根据随机模拟的统计原理,仍然可望控制计算的误差在可接受的范围 内.为了检验 Fast-DWMC 的性能,本文对一种理想工况(常凝并核)和一种实际工况(自由分子区布朗凝并 核)分别采用 Normal-DWMC 方法与 Fast-DWMC 方法进行模拟计算.比较两种方法发现 Fast-DWMC 的计算 效率有大幅度的提高,计算代价仅为 O(*N*<sub>s</sub>),特别是对需要大量模拟颗粒、颗粒群信息量较大的实际工况来 说,加速效果更加明显,可达上千倍的加速比,而且计算精度并没有明显损失,计算误差相对稳定,能够较准 确地描述颗粒尺度分布的演变过程.

## 1 原理与方法

## 1.1 Normal-DWMC 方法

颗粒群平衡模拟的 MC 方法均基于加权模拟颗粒概念,即认为一类尺度相同或者相近的实际颗粒具有 相同的动力学属性和行为,这一类实际颗粒由若干颗模拟颗粒代表,模拟颗粒的数目权值表示该模拟颗粒所 代表的实际颗粒的数目,通过跟踪模拟颗粒群的演变过程来描述所计算的实际颗粒群的演变过程.由于实际 颗粒群往往是多分散性的,且凝并、破碎、沉积等动力学事件也会导致多分散尺度谱动态变化,如果每颗模拟 颗粒权值相等,在模拟颗粒数目受计算规模限制的条件下,数密度较小的稀疏区域将仅仅有少量甚至没有模 拟颗粒来代表,这会导致较大的统计误差或颗粒尺度谱信息的丢失.为了尽量克服上述方法的缺点,发展了 异权值 Monte Carlo 方法(DWMC).

在 DWMC 策略下,模拟颗粒 i, j 的数目权值分别为  $w_i, w_j$ ,且  $w_i \neq w_j$ ,首先要制定异权值模拟颗粒间的

凝并准则.假设 i 和 j 发生凝并时,它们所代表的若干实际颗粒均只有 min(w<sub>i</sub>,w<sub>j</sub>)颗发生实际的凝并事件, 生成了 min(w<sub>i</sub>,w<sub>j</sub>)颗尺度为(v<sub>i</sub>+v<sub>j</sub>)的新颗粒.把凝并后的实际颗粒分成两类,①是凝并产生的新颗粒,② 是没有发生凝并的原颗粒,此两类颗粒仍然分别用模拟颗粒 i 和 j 表示,即对原颗粒的信息(数目权值、颗粒 尺度等)进行更新,更新方法为

$$w_{i,\text{old}} > w_{j,\text{old}} \begin{cases} w_{i,\text{new}} = w_{i,\text{old}} - w_{j,\text{old}}; & v_{i,\text{new}} = v_{i,\text{old}}, \\ w_{j,\text{new}} = w_{j,\text{old}}; & v_{j,\text{new}} = v_{i,\text{old}} + v_{j,\text{old}}, \end{cases}$$
(2)

$$w_{i,\text{old}} = w_{j,\text{old}} \begin{cases} w_{i,\text{new}} = w_{i,\text{old}}/2; & v_{i,\text{new}} = v_{i,\text{old}} + v_{j,\text{old}}, \\ w_{j,\text{new}} = w_{j,\text{old}}/2; & v_{j,\text{new}} = v_{i,\text{old}} + v_{j,\text{old}}, \end{cases}$$
(3)

其中下角码 "new"和 "old"分别代表凝并前和凝并后.这种处理方法使模拟颗粒数目保持恒定,具有相对稳定的样本空间,保证模拟的随机误差能够控制在一定范围内.在一个体积为 V<sub>s</sub> 的模拟区域内,与该凝并准则相对应的异权值模拟颗粒凝并速率 R<sup>2</sup><sub>coag</sub> 为<sup>[20]</sup>

$$R_{\text{coag}} = \frac{1}{2V_{s}^{2}} \sum_{i=1}^{N_{s}} \sum_{j=1, \neq i}^{N_{s}} \beta_{ij}, \qquad (4)$$

其中

$$\beta_{ij} = \beta_{ij} w_j \frac{2 \max(w_i \omega_j)}{w_i + w_j} .$$
<sup>(5)</sup>

一般理论上认为颗粒动力学事件的发生是一个标准的 Markov 过程,即将来的事件只与当前状态有关,与过去的状态无关,两次动力学事件之间的等待时间满足指数分布.在事件驱动模式中,第(k = 1)个事件之后的等待时间 $\Delta t_{ED,k}$ 与凝并速率 $R'_{coar,k}$ 成反比,即

$$\Delta t_{\rm ED,k} = \frac{1}{V_{\rm s} R_{\rm coag,k}'} = 2 V_{\rm s} / \left( \sum_{i=1}^{N_{\rm s}} \sum_{j=1, j\neq i}^{N_{\rm s}} \beta_{ij} \right).$$
(6)

两颗模拟颗粒 i 和 j 发生凝并事件的概率满足

$$P_{ij} = \beta_{ij}^{\prime} / \sum_{i=1}^{N_s} \sum_{j=1, \neq i}^{N_s} \beta_{ij}^{\prime}$$
(7)

分布.凝并对 *i* 和 *j* 的选择是按一定的概率分布随机确定的,通常可采用累积概率法或接受 – 拒绝法<sup>[4]</sup>来选择凝并对,其中接受 – 拒绝法在某些情况下可以提高计算效率.如果 [0,1]范围内均匀分布的随机数 *r* 满足

$$r \leq \beta_{ij}' / \beta_{\max}' \tag{8}$$

条件,则认为模拟颗粒i和j发生凝并事件,其中 $\beta_{max}^{\prime} = \sum_{i=1;j=1, \neq i}^{N_{ax}} \{\beta_{ij}^{\prime}\}$ .即使估计的最大凝并核比实际的最大 凝并核大,理论上接受 – 拒绝法也仍然能正确选择凝并对,但是,显然估计的最大凝并核越大,接受 – 拒绝法 的计算效率越低、计算代价越大.

注意到以上所述的 Normal-DWMC 方法,为了在每个时间步长后实时计算最大凝并核  $\beta'_{max}$ 和等待时间 (时间步长)  $\Delta t$ ,需要对模拟颗粒群进行双重遍历;即使利用智能薄记技术更新  $\beta'_{max}$ ,虽然仅需对发生凝并事 件的颗粒对进行双重遍历,但仍然是一个小范围内的局部双重遍历.这就是 Normal-DWMC 方法计算代价高 达  $O(N_s^2)$  的原因.本文提出的 Fast-DWMC 试图抛弃双重遍历的模式,以单重遍历获取所需要的颗粒群信息, 以达到加速的目的.

## 1.2 Fast-DWMC 方法

#### 1.2.1 强核函数

Eibeck 和 Wagner<sup>[13-14]</sup> 发展了一种基于事件驱动的高效 MC 方法,提出了强核函数的概念,对常规的凝 并核函数 $\beta_{ij}$ 进行变量分离和一定范围内的放大,构造出强核函数 $\hat{\beta}_{ij}$ , $\hat{\beta}_{ij} \ge \beta_{ij}$ .强核函数 $\hat{\beta}_{ij}$ 一般为如下形式 为 $\hat{\beta}_{ij} = \sum_{k} [h_{k}(i) \times g_{k}(j)](其中 h_{k}(i) g_{k}(j) 是与颗粒 i j 内部变量(如体积)相关的函数,强核函数是对$  $常规核函数的近似变换,从数学形式上对颗粒相关变量进行因式分解),那么<math>\beta_{max} \le \hat{\beta}_{max} = \sum_{k} [max(h_{k}(i)) \times max(g_{k}(j))],只需对颗粒群进行单重遍历即可得到 max(h_{k}(i)) xmax(g_{k}(j)), 据此求出<math>\hat{\beta}_{max}$ ,此时可在 等权值 MC 中利用接受-拒绝法来选择成功的凝并对.

在异权值 MC 中,如果采用接受-拒绝法来选择凝并对,则需要合理估计异权值凝并核 β<sub>ij</sub>的最大值.表1 列举了本文所涉及的两种工况的异权值强核函数.以自由分子区布朗凝并工况为例来说明.对于常规凝并核 的强函数,引入颗粒对体积比值 *a* = *v<sub>i</sub>/v<sub>j</sub>*,则强核函数可表示为

$$\hat{\beta}_{ij} = \sqrt{2} K_{\rm fm} v_j^{1/6} (a^{2/3} + a^{1/6} + 1 + a^{-1/2}).$$
(9)

由于

$$\frac{2w_j \max(w_i \mid w_j)}{w_i + w_j} \leqslant 2w_j , \qquad \frac{v_{\min}}{v_j} \leqslant a = \frac{v_i}{v_j} \leqslant \frac{v_{\max}}{v_j}$$

所以

$$eta_{ij}\Big(rac{2w_j ext{max}(w_i,w_j)}{w_i+w_j}\Big) \leqslant \hat{eta}_{ij}\Big(rac{2w_j ext{max}(w_i,w_j)}{w_i+w_j}\Big) \leqslant 2\hat{eta}_{ij}w_j$$
 ,

 $\hat{\beta}_{ij} = \sqrt{2} K_{\text{fm}} v_j^{1/6} (a^{2/3} + a^{1/6} + 1 + a^{-1/2}) \leq \sqrt{2} K_{\text{fm}} v_j^{1/6} [(v_{\text{max}}/v_j)^{2/3} + v_{\text{max}}/v_j)^{1/6} + 1 + (v_{\text{min}}/v_j)^{-1/2}],$ 因此可定义异权值凝并核的强函数  $\hat{\beta}_{ij}$ 为

$$\hat{\beta}_{ij} = 2\hat{\beta}_{ij}w_j = 2\sqrt{2}K_{\rm fm}v_j^{1/6}w_j \left[1 + (v_{\rm max}/v_j)^{1/6} + (v_{\rm max}/v_j)^{2/3} + (v_{\rm min}/v_j)^{-1/2}\right],$$
(10)

此时只需要单重遍历颗粒群,就可以得到异权值强核函数的最大值 $\hat{\beta}_{max}$ ,以此作为 $\beta_{max}$ 的估计值,且满足  $\beta_{max} \leq \hat{\beta}_{max}$ ,理论上整个过程的计算代价为 O( $N_s$ ).其他凝并工况的异权值强核函数也可类似得到.

表1 计算工况的常规凝并核函数与对应的强核函数

Fable 1	Normal a	nd majorant	coagulation	kernels
			conguineron	

I	况	表达式		
	常规凝并核函数	$oldsymbol{eta}_{ij} = A$		
常数凝并核	常规凝并核的强函数	$\hat{\beta}_{ij} = A$		
	异权值凝并核的强函数	$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{ij} = 2Aw_j$		
	常规凝并核函数	$\beta_{ij} = K_{\rm fm} \left( v_i^{1/3} + v_j^{1/3} \right)^2 \left( v_i^{-1} + v_j^{-1} \right)^{1/2}$		
自由分子区布朗凝并核	核 常规凝并核的强函数	$\hat{\beta}_{ij} = \sqrt{2}K_{\rm fm} \left( v_i^{1/6} + v_j^{1/6} + v_i^{2/3}v_j^{-1/2} + v_j^{2/3}v_i^{-1/2} \right)$		
	异权值凝并核的强函数	$\hat{\beta}'_{ij} = 2\sqrt{2}K_{\rm fm}v_j^{1/6}w_j \left[ \left( v_{\rm max}/v_j \right)^{2/3} + \left( v_{\rm max}/v_j \right)^{1/6} + 1 + \left( v_{\rm min}/v_j \right)^{-1/2} \right]$		

注: 其中 A 为一常系数,  $K_{\text{fm}} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/6} \left(\frac{6k_{\text{B}}T}{\rho_{\text{p}}}\right)^{1/2}$ ,  $k_{\text{B}}$ 为 Boltzmann 常数, T 为气体热力学温度,  $\rho_{\text{p}}$  为颗粒密度.

### 1.2.2 Fast-DWMC 方法描述

Fast-DWMC 方法中,首先对颗粒群进行单重遍历获得异权值强核函数的最大值 $\hat{\beta}_{max}$ ,然后直接应用接受 – 拒绝过程来选择发生凝并事件的凝并对.如果随机数r满足

$$r \leqslant \beta_{ij}^{\prime} / \hat{\beta}_{\max}^{\prime} \tag{11}$$

条件,则认为模拟颗粒i和j发生凝并事件,即接受动作;在接受动作之前可能要拒绝若干个颗粒对,设拒绝的颗粒对数量为 $N_i(N_i \ge 0)$ ,这样整个接受 – 拒绝过程涉及到的颗粒对数量为 $(N_i + 1)$ ,而且是随机选择的,因此可以将接受 – 拒绝过程看作从颗粒群随机抽取样本的过程,用样本(接受 – 拒绝的所有颗粒对)的平均 凝并概率作为总体(颗粒群的全部颗粒对)平均凝并概率的估计值,再乘以总体容量 $N_i(N_i - 1)/2($ 所有颗 粒对组合数量),即可得到总凝并概率的估计值,由此计算出凝并过程的近似等待时间(时间步长)

$$\tau = \frac{2V_{s}}{\sum_{i=1}^{N_{s}} \sum_{j=1, \neq i}^{N_{s}} \beta_{ij}} = \frac{2V_{s}}{N_{s}(N_{s}-1)\bar{\beta}_{ij}} \doteq \frac{2V_{s}(N_{r}+1)}{N_{s}(N_{s}-1)\sum_{k=1}^{N_{r}+1} \beta_{ij,k}} , \qquad (12)$$

其中  $\beta_{ijk}$  为第 k 次拒绝的颗粒对的异权值凝并核. 其算法流程如图 1 所示.

对于最大凝并核的估计,需要说明的是, $\hat{\beta}_{max}$ 需要控制在一定范围内,在该范围内 $\hat{\beta}_{max}$ 越大,拒绝事件就 越多,这样就增大了计算代价,但随机抽取的颗粒对样本数就越多,根据式(12)可知估计的等待时间会更准





确. 如果  $\hat{\beta}_{max}$  超过一定范围,不仅不能降低计算代价(相对于 Normal-DWMC 来说),而且计算过程还会出现 不可预料的后果,如计算进入死循环,即使能够在巨多的拒绝动作之后成功选择一对凝并颗粒,也不能反映 事件的概率分布规律.因此  $\hat{\beta}_{max}$  对该快速方法模拟结果的好坏具有非常重要的作用.

## 2 算法验证

某些理想工况中,考虑凝并事件的颗粒尺度分布函数时间演变过程存在理论分析解,且这些理想凝并核具有相应的物理意义,如常数凝并核表示凝并速率与颗粒尺度无关,它可视为布朗凝并的一种极端情况<sup>[12]</sup>.下面将在常数凝并核、自由分子区布朗凝并工况中对 Fast-DWMC 方法和 Normal-DWMC 方法的计算结果进行定量的分析比较.以下两种工况的算例均选取初始单分散颗粒群,模拟颗粒数 N<sub>s</sub> = 10 000, 且保持常数目.为了降低统计噪声,计算数据是对 3 次 Monte Carlo 循环进行统计平均的结果,条件参数详见表 2.

Table 2 Calculating parameters of conditions					
Case	$v_0$	$N_0$	$ au_{ m coag}$	β	
1	1	$1.0 \times 10^{10}$	$1/(N_0A)$	A	
2	1. 414 $\times 10^{-26}$ m <sup>3</sup>	$1.0 \times 10^{17}$	$1 / (N_0 K_{\rm fm} v_0^{-1/6})$	$K_{\rm fm} \left( \ u^{1/3} \ + \ v^{1/3} \right) \ ^2 \left( \ u^{-1} \ + \ v^{-1} \right) \ ^{1/2}$	
注:其中A=1.0×	$10^{-10} \mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{s}^{-1}$ , $K_{\mathrm{fm}} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/6}$	$\left(\frac{6k_{\rm B}T}{a}\right)^{1/2}$ , 气体热力的	学温度 T = 300 K ,Boltzmanr	□常数 k <sub>B</sub> = 1.38×10 <sup>-23</sup> J・K <sup>-1</sup> ,颗粒密度	

			表 2		计	计算工况的参数			
		•	<b>a</b> 1						

注: 其中  $A = 1.0 \times 10^{-10} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $K_{fm} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/6} \left(\frac{6k_BT}{\rho_p}\right)^{1/2}$ , 气体热力学温度 T = 300 K, Boltzmann 常数  $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ , 颗粒密度  $\rho = 1.000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ , 气体动力粘度  $\mu = 1.832 \times 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ .

## 2.1 计算代价

为了检验 Fast-DWMC 的计算效率 将计算的 CPU 时间与 Smith 等<sup>[21]</sup>的常数目 MC 方法和 Kruis 等<sup>[12]</sup>的 智能薄记方案的 CPU 时间进行比较(程序均在 Intel(R) Core(TM)2 Quad Q8300 @ 2.5GHz 的处理器、4GB 内存的个人台式电脑上运行),得到两种工况下不同 MC 方法的 CPU 时间  $t_{CPU}$ 与结果模拟颗粒数  $N_s$  之间的 关系,如图 2 所示.



图 2 计算速度比较

Fig. 2 Comparison of computing speeds

从图 2 可知,常规 MC 的计算代价高达  $O(N_s^2)$ ,而 Fast-DWMC 的计算代价为  $O(N_s)$ ,模拟颗粒越多, Fast-DWMC 的加速效果越明显(例如在自由分子区布朗凝并核工况下,采用 10 000 颗模拟颗粒,可达到 9 000 倍左右的加速效果(与常数目方法比较)),但同时也要考虑随机抽样方法估计时间步长引入的统计误差 对计算结果的影响程度,鉴于此,下面验证 Fast-DWMC 的计算精度.

2.2 计算精度的评估

根据 MC 方法计算精度的定量评判方法(针对初始单分散性颗粒群)<sup>10]</sup>,采用颗粒数目浓度、颗粒尺度 分布函数的平均误差来评价 DWMC 方法的计算精度.多次 MC 循环的颗粒数目浓度 N 的时间累计平均误 差为

$$\sigma_{N}(t) = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^{Q} \sqrt{\sum_{j=1}^{L} \Delta t_{j}^{i} \left(\frac{N_{j}^{i} - N_{j}^{\text{th}}}{N_{j}^{\text{th}}}\right)^{2} / \sum_{j=1}^{L} \Delta t_{j}^{i}} , \qquad (13)$$

颗粒尺度分布函数的时间累积平均误差为

$$\sigma_{\rm d}(t) = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^{Q} \sqrt{\sum_{j=1}^{L} \frac{\Delta t_j^i}{k_{\rm max} - k_{\rm min} + 1}} \sum_{k=k_{\rm min}}^{k_{\rm max}} (P_k^i(t) - P_k^{\rm th}(t))^2 / \sum_{j=1}^{L} \Delta t_j^i}, \qquad (14)$$

其中 ,Q 为 MC 循环次数 ,L 为整个计算过程中离散的时间窗口数目 , $\Delta t_j^i$  表示第 i 次 MC 循环第 j 个时间窗口 的时间步长 , $N_j^i$  表示第 i 次 MC 循环第 j 个时间窗口时颗粒数目浓度的模拟值 , $N_j^{h}$  表示第 j 个时间窗口时颗 粒数目浓度的理论值 , $k_{max}$ 、 $k_{min}$ 分别为颗粒群中尺度最大和最小颗粒所包含的单体颗粒(初始颗粒)的数目 ,  $P_k^i(t)$  为第 i 次 MC 循环中、t 时刻得到含有 k 个单体的颗粒的概率(MC 模拟结果);  $P_k^{h}(t)$  是对应的理论 解.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 [22].

2.2.1 常数凝并核工况(Case 1)

该工况中颗粒数目浓度 N(t)、特定时刻颗粒尺度分布  $P_k$ 、颗粒数目浓度标准偏差  $\sigma_N(t)$  以及颗粒尺度 分布的标准偏差  $\sigma_d(t)$  的计算结果如图 3 所示. 从总体上来看两种方法的计算精度的差别并不明显,误差的 范围均能控制在 2% 以内,特定时刻的颗粒尺度分布与理论分析解吻合地较好,但一般来说,Normal-DWMC 的结果要比 Fast-DWMC 的结果更精确. 图 3(a) 中颗粒数目浓度围绕理论分析解在一定范围内波动,Fast-DWMC 的波动范围较大,分析两者的计算过程可知:该工况下的异权值凝并核  $\beta_{ij} = Aw_j 2 \max(w_i, w_j) / (w_i + t)$   $w_j$ ),Normal-DWMC 通过双重遍历找到的 $\beta'_{max}$ ,Fast-DWMC 通过单重遍历找到模拟颗粒群中的 $w_{max}$ 并进而计算 $\hat{\beta}'_{max} = 2Aw_{max}$ ,两者的关系式是 $\beta'_{max} \leq \hat{\beta}'_{max} \leq 2\beta'_{max}$ ;接受-拒绝方法选择颗粒对的过程相似,但是 Normal-DWMC 在对颗粒群遍历过程中计算出的等待时间比 Fast-DWMC 计算的等待时间准确 特别是随着模拟颗粒数目权值差异的增大,随机抽样估计的时间步长误差增大,这就会导致模拟过程"超前于或滞后于"实际过程,即出现颗粒数目浓度有较大的波动.但这也没有明显地影响计算结果,计算误差仍在可控制的范围内,可以说 Fast-DWMC 方法大幅度提高了计算速度(如图 2(a)所示)同时也保证了较好的计算精度.



图 3 常数凝并核工况(Case 1) Fig. 3 Case 1, constant coagulation kernel

2.2.2 自由分子区布朗凝并工况(Case 2)

这里考虑一种广泛存在的实际工况——自由分子 区布朗凝并.由于布朗凝并的颗粒尺度分布函数 (PSDF)的时间演变没有理论分析解,这里将模拟得到 的特定时刻自保持分布与文献 [23]的自保持分布解进 行比较(如图4所示),其中无量纲颗粒尺度定义为 $\eta = v/\bar{v} = Nv/M$ ,无量纲颗粒概率密度函数为 $\psi = Mn(v, t)/N^2$ ,N为颗粒总的数目浓度,M为颗粒总的质量浓度 (或体积分数).

计算过程中 在第一个时间步先对颗粒群进行一次 单重遍历 得到颗粒的最大尺度  $v_{max}$ 和最小尺度  $v_{min}$ ,然 后根据表 1 中的异权值强核函数 ,再单重遍历一次找到 异权值强核的最大值  $\hat{\beta}_{max}$ ,作为最大异权值凝并核  $\beta_{max}$ 的估计值用于接受 – 拒绝过程.这里也采用了智能簿记





技术,从第二个时间步开始不再采用单重遍历颗粒群的方式找 v<sub>max</sub>和 v<sub>min</sub>,直接用新产生的颗粒尺度与上一时间步的 v<sub>max</sub>比较来确定新的 v<sub>max</sub> v<sub>min</sub>从上一个时间步内继承,这样能保证快速地找到 v<sub>max</sub>和 v<sub>min</sub>但还需考虑 v<sub>min</sub>在一定的演变时间后可能发生突变,原有的 v<sub>min</sub>在某次凝并事件后消失,这种情况可以在一定的时间点上 对颗粒群进行一次单重遍历更新,不需为了寻找 v<sub>max</sub>和 v<sub>min</sub>而在每个时间步内对颗粒群进行一次单重遍历.

该工况的物理参数详见表 2 模拟的演变时间为 1 000 τ<sub>coag</sub>, 计算结果的颗粒尺度是按照离散 – 分区法则 (颗粒尺度的前 20 类体积进行离散,后续的颗粒尺度按 1.08 的比例系数分成 100 个区间)处理.从图 4 中看 出,两类方法的结果均与尺度自保持曲线吻合地较好,与前面的工况类似: Fast-DWMC 方法结果的误差稍大

一些,但 Fast-DWMC 与 Normal-DWMC 相比有几百倍甚至上千倍的加速(如图 2(b)所示),这就使计算精度与计算代价的矛盾得到了缓解,以较小的计算精度的损失或得了计算效率的显著提升.

前面已经分析过 $\hat{\beta}_{max}$ 对接受 – 拒绝选择凝并对的重要性,由于此两种工况的凝并核是颗粒的尺度和权值的函数,颗粒尺度和权值并不相互独立,而且演变过程中颗粒的平均尺度增大,尺度谱范围扩张,数目权值减小,因此实际的最大凝并核 $\beta_{max}$ 变化规律较复杂.计算过程中没有出现拒绝次数过多而引起的计算效率降低的情况,这也说明了前面构造的加权强核对最大凝并核的估计是比较准确的,在满足 $\hat{\beta}_{max} \ge \beta_{max}$ 的条件下,两者的比例 $\theta = \hat{\beta}_{max} / \beta_{max}$ 保持在一个相对稳定的范围内,如图 5 所示.



3 结论

颗粒凝并过程的随机模拟,关键之处是确定颗粒群的平均凝并速率,然后依照事件发生的概率分布随机确定发生凝并事件的颗粒对,事件完成后对颗粒群的信息进行更新.对于模拟颗粒数为 $N_s$ 的颗粒群,二元凝并事件的数量是所有颗粒的组合数 $\binom{N_s}{2} = N_s(N_s - 1)/2$ ,知道每个事件的概率即可获得平均凝并速率和事件的概率分布,这通常需要对颗粒群进行二重遍历,模拟过程的计算代价绝大部分消耗在这种二重遍历上.

考虑到接受 – 拒绝方法只需要知道所涉及的若干个接受 / 拒绝事件的概率以及颗粒群的最大凝并速率 即可随机确定凝并事件的发生.进一步,设想可以把接受 / 拒绝的事件看作全部事件的一个随机样本,根据这 个样本的平均凝并速率来估计整个颗粒群的平均凝并速率.从这一个思路出发,结合强核函数单重遍历估计 最大凝并核的思想,可实现快速 MC 模拟,此时整个过程只需单重遍历即可完成,以获得显著的计算加速.

本文基于"异数目权值颗粒群"策略,在事件驱动模式下实现了 Fast-DWMC 这种加速方法,与 Normal-DWMC 进行对比,定量分析了计算代价和计算精度等方面的表现,从计算的结果来看,改进后的方法对计算 速度有非常明显的提升,可达数百被乃至数千倍的提速,而且计算精度的损失并不明显.

参考文献

- [1] Ramkrishna D. Population balance: Theory and applications to particulate systems in engineering [M]. San Diego; Academic Press, 2000: 47 116.
- [2] Deng L, Li G. A summarization on Monte Carlo simulation in particle transport [J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2010, 27(6): 791-798.
- [3] 赵海波,郑楚光.离散系统动力学演变过程的颗粒群平衡模拟[M].北京:科学出版社,2008.
- [4] Garcia A L, Van Den Broeck C, Aertsens M, et al. A Monte Carlo simulation of coagulation [J]. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 1987, 143(3): 535 - 546.
- [5] Liffman K. A direct simulation Monte-Carlo method for cluster coagulation [J]. Journal of Computational Physics, 1992, 100 (1): 116-127.

- [6] 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.
- [7] Zhao H, Zheng C. A new event-driven constant-volume method for solution of the time evolution of particle size distribution
   [J]. Journal of Computational Physics, 2009, 228(5): 1412 1428.
- [8] Zhao H, Zheng C, Xu M. Multi-Monte Carlo method for particle coagulation: Description and validation [J]. Applied Mathematics and Computation, 2005, 167(2): 1383-1399.
- [9] Zhao H, Zheng C, Xu M. Multi-Monte Carlo method for coagulation and condensation/evaporation in dispersed systems [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2005, 286(1): 195 – 208.
- [10] Zhao H, Kruis F E, Zheng C. A differentially weighted Monte Carlo method for two-component coagulation [J]. Journal of Computational Physics, 2010, 229(19): 6931-6945.
- [11] 多相复杂系统国家重点实验室多尺度离散模拟项目组. 基于 GPU 的多尺度离散模拟并行计算[M]. 北京: 科学出版 社,2009.
- [12] Kruis F E, Maisels A, Fissan H. Direct simulation Monte Carlo method for particle coagulation and aggregation [J]. AIChE Journal, 2000, 46(9): 1735 1742.
- [13] Eibeck A, Wagner W. An efficient stochastic algorithm for studing coagulation dynamics and gelation phenomena [J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2000, 22(3): 802 821.
- [14] Eibeck A, Wagner W. Stochastic particle approximations for Smoluchoski's coagulation equation [J]. The Annals of Applied Probability, 2001, 11(4): 1137-1165.
- [15] Irizarry R. Fast Monte Carlo methodology for multivariate particulate systems—I: Point ensemble Monte Carlo [J]. Chemical Engineering Science, 2008, 63(1): 95 - 110.
- [16] Irizarry R. Fast Monte Carlo methodology for multivariate particulate systems-II: PEMC[J]. Chemical Engineering Science, 2008, 63(1): 111-121.
- [17] Lécot C, Tarhini A. A quasi-stochastic simulation of the general dynamics equation for aerosols [J]. Monte Carlo Methods and Applications, 2008, 13(5-6): 369-388.
- [18] Li S, Tian D, Deng L. High efficiency Monte Carlo sample method for super-high energy neutrons [J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2011, 28(3): 323 - 328.
- [19] Zhao H, Kruis F E, Zheng C. Reducing statistical noise and extending the size spectrum by applying weighted simulation particles in Monte Carlo simulation of coagulation [J]. Aerosol Science and Technology, 2009, 43(8): 781-793.
- [20] Zhao H, Zheng C. The event-driven constant volume method for particle coagulation dynamics [J]. Science in China Series E-Technological Sciences, 2008, 51(8): 1255 - 1271.
- [21] Smith M, Matsoukas T. Constant-number Monte Carlo simulation of population balances [J]. Chemical Engineering Science, 1998, 53(9): 1777 - 1786.
- [22] Seinfeld J H, Pandis S N. Atmospheric chemistry and physics from air pollution to climate change [M]. New York: Wiley , 1998.
- [23] Vemury S, Pratsinis S E. Self-preserving size distributions of agglomerates [J]. Journal of Aerosol Science, 1995, 26(2): 175– 185.

## Fast Monte Carlo Method for Particle Coagulation Dynamics

XU Zuwei , ZHAO Haibo , LIU Xin , ZHENG Chuguang

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

**Abstract**: We propose a fast random simulation strategy based on differentially weighted MC. The strategy improves computation efficiency significantly, and guarantees enough calculation accuracy, thus coordinates contradiction between computation cost and computation accuracy. The main idea is based on majorant kernel. It is possible to transfer a traditional coagulation kernel to a majorant kernel through splitting and amplifying slightly. The maximum of majorant kernel is obtained by single looping over all simulation particles. The maximum majornant kernel is used to approximate the maximum coagulation kernel in particle population , and is further used to search coagulation particle pairs randomly with acceptance-rejection method. The waiting time (time-step) for a coagulation event is calculated by summing coagulation kernels of particle pairs involved in acceptance/rejection processes. Double looping in normal Monte Carlo simulation is avoided and computation efficiency is improved greatly.

Key words: population balance modeling; coagulation; Monte Carlo method; differentially weighted simulation particles; particle size distribution

**Received date**: 2012 - 04 - 13; **Revised date**: 2012 - 08 - 06