

文章编号: 1000-0887(2005) 07-0875-08

求解考虑颗粒凝并的通用动力学方程的多重 Monte Carlo 算法

赵海波, 郑楚光, 徐明厚

(华中科技大学煤燃烧国家重点实验室, 武汉 430074)

(李家春推荐)

摘要: Monte Carlo(MC)方法被广泛用于通用动力学方程的求解,然而普通MC方法的计算代价较高而计算精度不稳定.提出一种新的多重 Monte Carlo(MMC)算法来求解 GDE,该算法同时具有基于时间驱动 MC 方法、常数目法和常体积法的特点.首先详细介绍了该算法,包括加权虚拟颗粒的引入,MMC 算法的计算流程,时间步长的设置,颗粒是否发生凝并事件的判断,凝并伙伴的寻找,凝并事件的后果处理.然后利用 MMC 算法对存在理论分析解的 5 种特殊工况进行数值求解,模拟结果与理论解符合很好,证明 MMC 算法具有良好的计算精度和较低的计算代价.最后分析了不同类型的凝并核对于凝并过程的影响,常凝并核和连续区布朗凝并核对小颗粒影响大一些,而线性凝并核和二次方凝并核对大颗粒影响大一些.

关键词: 数值算法; 粒数衡算方程; 虚拟颗粒; 颗粒尺度分布; 凝并核; 计算代价; 计算精度

中图分类号: O343.5 文献标识码: A

引 言

可吸入颗粒物(PM₁₀, 空气动力学直径小于 10 μm 的颗粒)越来越受到关注,燃烧,如锅炉煤粉燃烧,交通工具的汽油/柴油燃烧,生活垃圾等废弃物燃烧等,是 PM 的主要来源之一^[1].燃烧过程中颗粒的凝并和破碎等是生成超细微颗粒物的主要机理之一,而促进超细微颗粒物在燃烧、迁移和排放过程中凝并长大则是控制 PM 的主要策略之一^[1].另外,大气中雾、雨、气溶胶等和化工中乳胶液等的形成演变以及超细微粉体的制备也与颗粒(液滴)之间的凝并或聚合关系重大.颗粒动力学演变过程中的尺度分布是其关键参数之一^[2],颗粒尺度分布(particle size distribution, PSD)的时间演变过程数学上可由通用动力学方程(general dynamic equation, GDE)或称为粒数衡算方程(population balance equation, PBE)所描述^[3],本文主要注重于考虑颗粒凝并的 GDE 的数值解法方面,考虑颗粒凝并的 GDE 如下:

$$\frac{dn_p(v, t)}{dt} = \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v-u, u) n_p(v-u, t) n_p(u, t) du -$$

* 收稿日期: 2004_08_12; 修订日期: 2005_03_08

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

作者简介: 赵海波(1977—),男,湖南宁乡人,讲师,博士(联系人, Tel/Fax: + 86_27_87545526; E_mail: kllinsmannzhb@163.com)•

$$n_p(v, t) \int_0^{\infty} \beta(v, u) n_p(u, t) du, \quad (1)$$

其中 $n_p(v, t)$ 为时刻 t 、体积为 v 的颗粒的数目浓度 ($(N/m^3)/m^3$, N 表示颗粒数目), $\beta(u, v)$ 为体积分别为 u 和 v 的两颗粒的凝并核 $(m^3/N)/s$, 代表了单位体积、单位时间内这两颗颗粒发生一次凝并的概率。本文中, 颗粒凝并完全由碰撞引起, 所以文中的碰撞、凝并等均为一意义, 所有凝并均为二元凝并。方程(1)左边为体积为 v 的颗粒的数目浓度的时间变化率, 右边第1项为生成项, 表示体积为 $(v-u)$ 的颗粒和体积为 u 的颗粒由于凝并而生成体积为 v 的颗粒, 第2项为消亡项, 表示体积为 v 的颗粒与其他颗粒发生凝并而使得自身消亡。

目前最常见的 GDE 数值解法有矩方法、Monte Carlo (MC) 算法^[3~8]、分区法、离散模型、离散分区法、有限元法等, 各有其优缺点。以时间步长的设定方法可把求解 GDE 的 MC 分为两大类, 一类是基于时间驱动 (time_driven) 的 MC 算法^[3,4], 在动力学事件发生之前设置时间步长; 另外一类是基于事件驱动 (event_driven) 的 MC 算法^[5~8], 动力学事件之间的时间尺度依据已知的事件概率计算出。另外一方面, 如果依据颗粒演变过程中模拟颗粒数目和计算区域是否发生变化而划分, MC 算法也可以分为两大类, 一类是常体积 (constant_volume) 法^[3~5], 即动力学演变过程中计算区域体积保持不变, 但是颗粒总数目 N 可能会发生改变, 由于 MC 算法的计算精度与 N 的 $1/2$ 次方成反比, 常体积法无法保持稳定的计算精度; 另外一类为常数目 (constant_number) 法^[6~8], 它基于事件驱动, 随着颗粒数目的变化, 收缩或扩展计算区域, 虽然保证了稳定的计算精度, 但是难于工程实际应用。

鉴于目前计算机计算能力的限制, Monte Carlo 算法均只能模拟 $10^3 \sim 10^7$ 个模拟颗粒的时空演变, 而普通尺度的计算区域内实际颗粒体积可以达到 10^{10} 或更多, 目前几乎所有的求解 GDE 的 Monte Carlo 算法^[4~8] 均引用“子系统”的概念, 认为整体系统是充分混合搅拌而空间各向同性, 那么具备周期性边界条件、包含 $10^3 \sim 10^7$ 个实际颗粒的子系统是整个系统的指示器。这使得这些 MC 算法无法真实模拟整体系统的动力学演变, 更无法描述 PSD 的空间扩散。为了改进现有 MC 算法的这些缺陷, 特别是无法协调计算代价和计算精度的矛盾和“子系统”的局限性, 本文提出了一种新的多重 Monte Carlo 算法。

1 多重 Monte Carlo 算法描述

1.1 加权虚拟颗粒的引入

该 MC 算法抛弃“子系统”概念, 并不跟踪实际颗粒的演变, 而是引入加权的“虚拟颗粒”的概念, 该算法描述虚拟颗粒的动力学演变过程。认为一组体积相同或者相近的实际颗粒具备同样的属性和行为, 这些实际颗粒由一颗或几颗虚拟颗粒代表, 虚拟颗粒是这些实际颗粒的指示器, 虚拟颗粒的演变过程可以代表计算区域内实际颗粒的演变过程。生成虚拟颗粒的步骤如下: 对计算区域内的实际颗粒进行分类处理, 按照每类颗粒的实际颗粒数目的多少, 分配相应数目的虚拟颗粒来代表这些实际颗粒, 每颗虚拟颗粒 i 赋予一个数目权值 w_i , w_i 表示虚拟颗粒 i 所代表的当地实际颗粒的个数, 一般来说, 虚拟颗粒比实际颗粒数目小得多, 数值模拟过程中跟踪的是虚拟颗粒, 相比较于跟踪所有实际颗粒, 这种处理要减少计算代价, 特别是当计算区域颗粒数目较多时, 该方法在计算代价方面有很大优势。并且“虚拟颗粒”的引入使得模拟整体系统的颗粒尺度分布的空间扩散成为可能。

1.2 MMC 算法流程

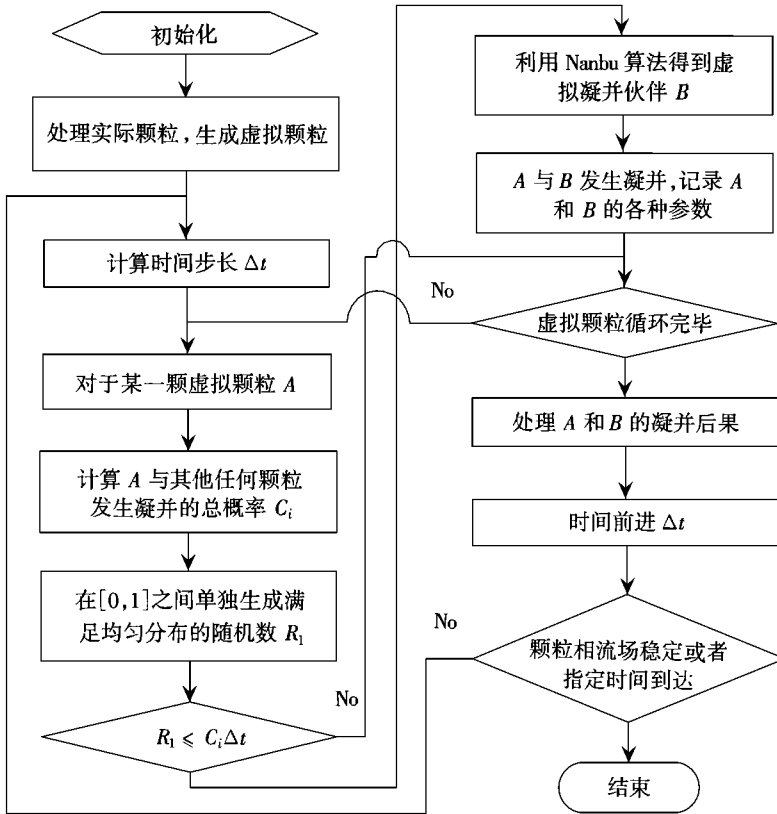


图 1 多重 Monte Carlo 算法流程图

该 MC 算法基于时间驱动 MC 技术, 在一个实时设定的时间步长范围内, 考虑颗粒之间的凝并, 虽然颗粒凝并过程导致总的实际颗粒数目不断减少, 但此时通过调整相关虚拟颗粒的数目权值和体积来体现凝并事件的后果, 能同时保持虚拟颗粒数目和计算区域体积不变。本文命名此种算法为多重 Monte Carlo (multi_Monte Carlo, 以下简称 MMC) 算法是指其同时具备时间驱动 MC、常数目法和常体积法的特点。MMC 算法的流程如图 1 所示。

值得注意的是, 在一个时间步长内, 颗粒即使发生了凝并, 也不会立即影响本时间步长内的这颗颗粒和相关颗粒, 而只会在下一个时间步长内影响这颗颗粒与相关颗粒的行为属性。所以在当前时间步长内的整个颗粒循环全部结束之后, 再进行凝并的后果处理。

1.3 时间步长的设置

基于时间驱动的 MC 方法中时间步长设置的关键在于: 保证在一个实时设定的时间步长范围内, 每颗颗粒最多只可能发生一次凝并, 这样才不至于遗漏颗粒的凝并事件。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 , 那么某颗虚拟颗粒 i 与其他任何虚拟颗粒在单位时间内发生凝并事件的总概率为:

$$C_i = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_f} [\beta_j \times w_j] \approx \sum_{j=1}^{N_f} \beta_j \times w_j \quad (2)$$

所以虚拟颗粒 i 发生一次凝并事件的时间尺度为 $t_{i,c} = 1/C_i$ 。于是时间步长应该小于等于最小的凝并时间尺度, 即: $\Delta t \leq \min(t_{i,c}) = 1/\max(C_i)$ 。一般来说为了增加 MC 循环的次数以增加计算精度, 时间步长设置如下: $\Delta t = \alpha/\max(C_i)$, $\alpha \leq 0.01$ 。

1.4 凝并是否发生的判断

利用 Nanbu 算法^[9]来判断凝并事件的发生和寻找凝并伙伴。如果 R_1 为满足均匀分布、位于 $[0, 1]$ 的随机数, 则判断当前跟踪的虚拟颗粒 i 是否发生凝并的数学关系式为: $R_1 \leq C_i \Delta t$ 。

1.5 凝并伙伴的选择

一旦判定跟踪虚拟颗粒 i 会与计算区域内其他某颗虚拟颗粒发生凝并, 则需要选定具体是哪颗虚拟颗粒是其凝并伙伴。首先计算得到跟踪颗粒 i 与某颗虚拟颗粒 j 发生凝并的概率如下 $P_{ij} = w_j \times \beta_{ij} \times \Delta t$; 然后仍然通过随机数 R_1 来判断与虚拟颗粒 i 发生凝并的伙伴颗粒 j , 如果以下关系得到满足, 则认为虚拟颗粒 j 为 i 的凝并伙伴:

$$\sum_{k=1}^{j-1} P_{ik} \leq R_1 \leq \sum_{k=1}^j P_{ik}, \quad j \in [1, N_i] \quad (3)$$

1.6 凝并事件的后果处理

如果虚拟颗粒 i 和 j 发生凝并事件, MMC 算法通过调整它们的数目权值(分别为 w_i 和 w_j) 和体积(分别为 v_i 和 v_j) 来体现凝并后果, 并同时保持虚拟颗粒总数目和计算区域体积不变。

Nanbu 等^[10]认为加权的模拟颗粒之间的碰撞次数为 $\min(w_i, w_j)$, 文献^[11]按照这种思想实现了颗粒凝并事件的后果处理, 但是当时间演变长度远远大于凝并特征时间尺度时, 存在一些数值误差。实际上, 虚拟颗粒是实际颗粒的代表, 对于虚拟颗粒 i 和 j 之间的凝并, 可以不管该凝并事件的实际过程。认为该凝并事件的后果是生成了 $(w_i + w_j)/2$ 个体积为 $(v_i + v_j)$ 的新的实际颗粒。由于一个时间步长内每颗虚拟颗粒均需要判断其是否凝并和寻找其凝并伙伴, 所以对于同一凝并事件将被检测到 2 次。如果当前跟踪虚拟颗粒 i , 则只处理虚拟颗粒 i 以体现凝并事件的后果, 而不对当前的凝并伙伴 j 作任何改变:

$$w_{i, \text{new}} = w_i/2; \quad v_{i, \text{new}} = v_i + v_j \quad (4)$$

如果当前跟踪颗粒轮到虚拟颗粒 j 的时候, 理论上会检测到同一凝并事件, 且其凝并伙伴为虚拟颗粒 i , 同样仿照方程(4)仅仅改变当前跟踪的虚拟颗粒 j 的数目权值和体积以体现凝并事件的后果。这样不仅保持了整体虚拟颗粒数目的不变, 而且也符合凝并事实, 不管发生多少凝并事件和演变时间多久。

2 计算工况

本文选择存在理论分析解的特殊工况来检验本 MMC 算法。

2.1 工况 1: 单分散性颗粒的常凝并核工况, $\beta(u, v) = A$

这里 A 为常数, 表示凝并速率与颗粒尺度分布无关, 它可视为布朗凝并的一种极端情形, 理论分析解参照文献^[5]。

2.2 工况 2: 单分散性颗粒的线性凝并核工况, $\beta(u, v) = A(u + v)$

其中 u, v 分别为发生凝并的两颗颗粒的体积。这种工况表示两颗颗粒的凝并概率正比于两颗颗粒的体积总和, 通常可用于近似描述湍流重力机制作用下的颗粒凝并行为, 理论分析解参照文献^[5]。

2.3 工况 3: 单分散性颗粒的二次方凝并核工况, $\beta(u, v) = Auw$

这种工况是对凝结过程中的一种临界现象“凝胶化”的描述, 仅仅在 $t < 1/(N_0 A)$ 时才存在理论解^[5], 这里 N_0 为初始颗粒总数目。

2.4 工况 4: 单分散性颗粒的连续区布朗凝并工况

当颗粒粒径足够小以至于颗粒处于连续区时, 由于颗粒的布朗扩散而导致的凝并核

为^[12]:

$$\beta(u, v) = \frac{2k_B T}{3\mu} \left[2 + \left(\frac{u}{v} \right)^{1/3} + \left(\frac{v}{u} \right)^{1/3} \right], \quad (5)$$

其中 k_B 为波尔兹曼常数, T 为温度, μ 为气体(或液体)介质的动力学粘性系数。理论分析解参考文献[6]。

2.5 工况 5: 多分散性颗粒的连续区布朗凝并工况

满足对数正态分布、处于连续区的多分散性颗粒布朗凝并的分析解^[13]如下:

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

其中, $\sigma(t)$ 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; 凝并核同工况 4。

通常凝并核位于如下范围之内: $A \leq \beta(u, v) \leq A(u + v)$ 或 Auv 。

3 数值模拟

本文对于所有计算工况, 初始颗粒数目 $N_0 = 10^8 N/m^3$, 常数 $A = 10^{-9}$, 对于布朗凝并的工况, 温度 $T = 2500$ K, 模拟过程中温度认为不变, 玻尔兹曼常数 $k_B = 1.38054 \times 10^{-23}$ J·K, 介质动力粘性系数 $\mu = 1.83 \times 10^{-5}$ kg/(m·s)。

在 MMC 算法中, 工况 1 中虚拟颗粒数目为 3000, 工况 2 中虚拟颗粒数目为 2000, 工况 3 和工况 4 中虚拟颗粒数目均为 1000, 工况 5 中虚拟颗粒数目为 10000。工况 1~ 工况 4 中初始的颗粒尺度分布均为单分散性的; 工况 5 中初始 PSD 为多分散性的对数正态分布, 为了进行颗粒群的初始化和统计指定时刻的颗粒尺度分布信息, 对颗粒群离散为 200 类。

单分散性颗粒的所有工况中初始粒径均取为 1.24 (无量纲)。对于多分散性的工况 5, 本文选择初始几何标准方差 $\sigma_0 = 1.5$, 初始几何平均体积 $v_{g0} = 1.0 \mu m^3$; 本文认为工况 5 中满足对数正态分布的颗粒尺度谱范围为 $\ln v_{g0} - 12 \ln \sigma_0 \leq \ln v \leq \ln v_{g0} + 12 \ln \sigma_0$, 此时最小颗粒体积和粒径分别为 $7.701 \times 10^{-3} \mu m^3$ 和 $0.245 \mu m$, 最大颗粒的体积和粒径分别为 $127.746 \mu m^3$ 和 $6.281 \mu m$ 。

常凝并核的工况 1 中几个关键参数的模拟结果与理论解的比较如图 2 所示, 包括颗粒数目与初始颗粒数目的比值 ($N(t)/N_0$) 随时间变化曲线、颗粒平均质量与初始颗粒平均质量 ($M(t)/M_0$) 随时间变化曲线和颗粒平均质量的标准偏差 (σ) 随时间变化曲线, 模拟结果与理论值均符合非常好, 即使随着凝并事件的不断进行, 随着演变时间的不断延长, 实际颗粒数目大大减少, 仍然能够保证极好的计算精度。

图 3 综合显示了工况 2、工况 3 和工况 4 中相关关键参数的数值模拟结果与理论解的比较。其中包括线性凝并核的工况 2 和二次方凝并核的工况 3 中的 $N(t)/N_0$ 随时间变化曲线, 单分散性颗粒的连续区布朗凝并核的工况 4 中 $M(t)/M_0$ 随时间变化曲线。MMC 模拟值与理论值符合甚好, 以至于两条曲线几乎完全重叠在一起而难以区分开来。

工况 5 中 $N(t)/N_0$ 、 σ 和颗粒几何平均体积 ($v_g(t)/v_{g0}$) 随时间的演变曲线分别如图 4(a) 所示, 对于 $N(t)$ 和 $v_g(t)$, 理论值与 MMC 模拟值的符合非常满意。但是 σ 则存在一些差异。图 4(b) 为 PSD 在不同时间刻度处的曲线, PSD 整体上与理论分析解符合甚好, 随着时间的推移, PSD 曲线的峰值不断降低, 表明颗粒数目越来越少; 随着时间的推移, PSD 曲线往右推移, 表明颗粒体积越来越大; 在颗粒因为凝并而演变的过程中, 尺度分布函数基本满足对数正态分

布,这正是“自保持(self_preserving)”曲线^[12],随着时间的推, PSD 曲线与理论的对数正态分布符合情况变差,这与图 4(a)中的 σ 的误差是一脉相承的。这种误差可能与颗粒分类的方法以及虚拟颗粒的数目有关,也可能与文献[13]的理论解因为做了一些简化处理而并不严格有关,这需要进一步的验证和探讨。

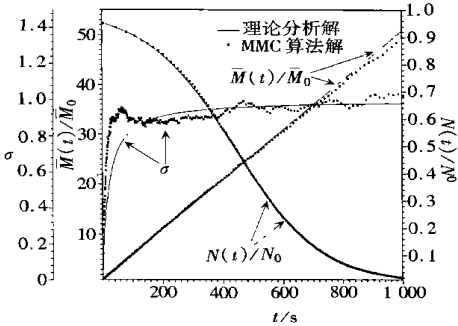


图 2 工况 1 中的参数随时间变化曲线图

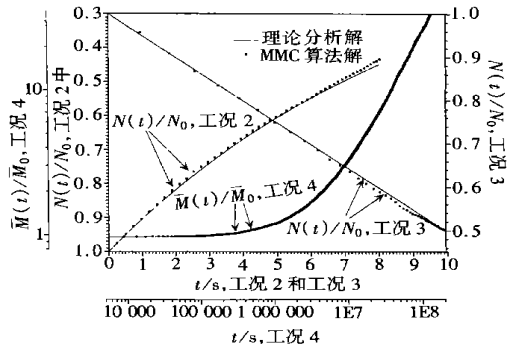
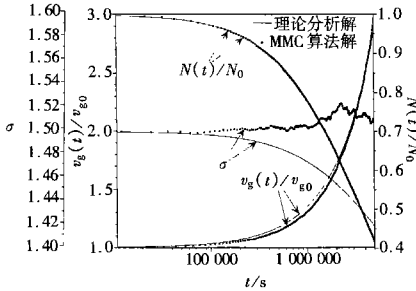
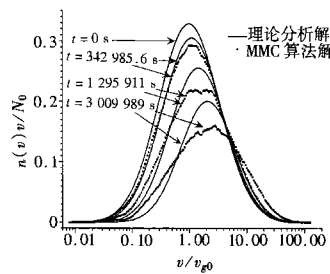


图 3 工况 2, 工况 3 和工况 4 中的参数随时间变化曲线图



(a)



(b)

图 4 工况 5 中的参数随时间变化曲线图

普通的 Monte Carlo 算法由于随着凝并过程的进行所模拟的颗粒总数目会减少,所以一般要处理更多的颗粒,而 MMC 算法由于处理比实际颗粒数目少得多的虚拟颗粒,必将大大减少计算代价。工况 1~ 工况 5 中设定的演变时间分别为 1 000 s、8 s、10 s、 10^8 s 和 5×10^6 s, MMC 算法的计算时间分别为 1 091 s、763 s、94 s、1 211 s 和 1 105 s (CPU 为 Athlon Xp 2 500+)。

4 分析和讨论

不同类型的凝并核对凝并过程的影响不同。在常凝并核工况中,不同大小的颗粒有着同样的凝并概率,同一时刻常凝并核对于体积较小的颗粒和体积较大的颗粒施加同样的影响;但是随着演变时间的推进,颗粒总数目减少,导致任何一颗颗粒 i 能够发生一次凝并事件的概率 C_i 减少,这将使得时间步长 Δt 随之不断增大。而线性凝并核和二次方凝并核工况中,体积较小的颗粒与其他颗粒发生凝并事件的概率要小于体积较大的颗粒的凝并概率,而且这两种工况中颗粒之间的凝并概率存在累积效应(线性累积或二次方累积),也就是说跟踪颗粒或凝并伙伴的体积越大,凝并概率越高;随着演变时间的延长,颗粒数目虽然减少,但是颗粒平均体积也相应增大,这使得某颗颗粒 i 的凝并概率 C_i 要复杂一些,对于线性凝并核工况和二次方凝并核而言,数值模拟中发现,凝并概率 C_i 均不断增大,导致时间步长均不断减少,相比较而言,在

本文的计算工况中,线性凝并核工况下凝并概率 C_i 要增大得快一些。对于连续区的布朗凝并核而言,由于两颗颗粒之间的凝并核取决于两颗颗粒的直径比值,使得该凝并核与颗粒尺度分布函数的相关性较小;而且在连续区布朗凝并核的工况 5 中,随着时间的演变,虽然颗粒平均质量不断增大,但是颗粒尺度分布的范围并无明显扩展,各种尺度范围的颗粒仍然存在,这也说明连续区布朗凝并核与颗粒尺度分布函数相关性较小,基本类似于常凝并核,常凝并核可作为连续区布朗凝并核的一种近似或极限情形。总之,相比较而言,常凝并核和连续区布朗凝并核对小颗粒影响大一些,而线性凝并核和二次方凝并核对大颗粒影响大一些。

与目前几乎所有的考虑凝并的 Monte Carlo 算法不同,MMC 算法由于引入加权的虚拟颗粒的概念,不仅具备适用于工程计算的计算代价,且可以抛弃“子系统”概念而模拟整体系统的颗粒尺度分布函数随时间和空间的演变规律;与常数目法^[6~8]类似,MMC 算法由于保持恒定的虚拟颗粒数目从而具备较高的计算精度;另外,MMC 算法保持常计算区域体积,可以方便地应用于工程实际计算和科学定量分析;最后,MMC 算法基于时间驱动技术,具备非常强的扩展能力,不但可以方便地把其他事件如冷凝/蒸发、成核、沉积和破碎等考虑进来,也可以对计算区域划分网格而把颗粒尺度分布函数的空间扩散考虑近来,甚至可以与求解颗粒运动方程的算法和两相湍流模型耦合起来,不但描述颗粒尺度分布函数的变化,而且描述颗粒的速度场等属性。本算法也可以进行多组分、多维、多分散性颗粒的 GDE 求解,这也是我们下阶段的研究重点之一。

通过更合理分类颗粒、适当的虚拟颗粒数目和增加 Monte Carlo 循环次数等应该可以进一步减少计算误差。

5 结 论

本文发展了求解考虑凝并的通用动力学方程(GDE)的多重 Monte Carlo(MMC)算法,它引入加权的虚拟颗粒的概念,模拟比实际颗粒数目小得多的虚拟颗粒,该算法基于时间驱动,凝并过程中虚拟颗粒数目保持不变,且计算区域的体积不变。本文利用 MMC 算法对五种不同类型凝并核的工况进行了数值模拟,模拟结果与理论分析解进行对照,基本上符合非常好,验证了 MMC 算法的计算精度,而且 MMC 算法具有较低的计算代价,能够应用于工程计算和一般的科学定量分析,且可作为其他求解 GDE 的方法的一个标准参照解。

[参 考 文 献]

- [1] Tucker W G. An overview of PM 2.5 sources and control strategies[J]. Fuel Processing Technology, 2000, 65(1): 379—392.
- [2] Meng Z, Dabdub D, Seinfeld J H. Size resolved and chemically resolved model of atmospheric aerosol dynamics[J]. Journal of Geophysical Research, 1998, 103(3): 3419—3435.
- [3] 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.
- [4] Liffman K. A direct simulation Monte Carlo method for cluster coagulation[J]. Journal of Computational Physics, 1992, 100(1): 116—127.
- [5] Kruijs F E, Maisels A, Fissan H. Direct simulation Monte Carlo method for particle coagulation and aggregation[J]. AIChE Journal, 2000, 46(9): 1735—1742.
- [6] Smith M, Matsoukas T. Constant number Monte Carlo simulation of population balances[J]. Chemical Engineering Science, 1998, 53(9): 1777—1786.

- [7] Lee K, Matsoukas T. Simultaneous coagulation and break_up using constant_N Monte Carlo[J]. Powder Technology, 2000, **110**(1/2): 82—89.
- [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] Nanbu K. Direct simulation scheme derived from the Boltzmann equation in Monocomponent gases [J]. Journal of the Physical Society of Japan, 1980, **49**(11): 2042—2049.
- [10] Nanbu K, Yonemura S. Weighted particles in coulomb collision simulations based on the theory of a cumulative scattering angle[J]. Journal of Computational Physics, 1998, **145**(2): 639—654.
- [11] ZHAO Hai_bo, ZHENG Chu_guang, XU Ming_hou. Multi_Monte Carlo method for particle coagulation: description and validation[J]. Applied Mathematics and Computation, 2005, **168**(2): .
- [12] Friedlander S K, Wang C S. The self_preserving particle size distribution for coagulation by Brownian motion[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1966, **22**(1): 126—132.
- [13] Lee K W, Lee Y J, Han D S. The log_normal size distribution theory for Brownian coagulation in the low Knudsen number regime[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1997, **188**(2): 486—492.

Multi_Monte Carlo Method for General Dynamic Equation Considering Particle Coagulation

ZHAO Hai_bo, ZHENG Chu_guang, XU Ming_hou

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

Abstract: Monte Carlo (MC) method is widely adopted to take into account general dynamic equation (GDE) for particle coagulation, however popular MC method has high computation cost and statistical fatigue. A new Multi_Monte Carlo (MMC) method, which has characteristics of time_driven MC method, constant number method and constant volume method, was promoted to solve GDE for coagulation. Firstly MMC method was described in details, including the introduction of weighted fictitious particle, the scheme of MMC method, the setting of time step, the judgment of the occurrence of coagulation event, the choice of coagulation partner and the consequential treatment of coagulation event. Secondly MMC method was validated by five special coagulation cases in which analytical solutions exist. The good agreement between the simulation results of MMC method and analytical solutions shows MMC method conserves high computation precision and has low computation cost. Lastly the different influence of different kinds of coagulation kernel on the process of coagulation was analyzed: constant coagulation kernel and Brownian coagulation kernel in continuum regime affect small particles much more than linear and quadratic coagulation kernel, whereas affect big particles much less than linear and quadratic coagulation kernel.

Key words: numerical solution; population balance equation; fictitious particle; particle size distribution; constant kernel; computation cost; computation precision