

考虑颗粒碰撞的多重 Monte Carlo 算法¹⁾

赵海波²⁾ 郑楚光 陈胤密

(华中科技大学煤燃烧国家重点实验室, 武汉 430074)

摘要 从减少计算代价和改进碰撞算法出发, 提出了考虑颗粒碰撞的多重 Monte Carlo 算法, 它采用直接模拟 Monte Carlo 算法来考虑颗粒碰撞, 并与求解颗粒拉氏 Langevin 方程的 Monte Carlo 算法耦合起来, 跟踪比实际颗粒数目小得多的虚拟颗粒. 提出了时间步长选定标准、虚拟碰撞伙伴所在控制容积的判断准则、颗粒碰撞发生的判断准则、虚拟碰撞伙伴的选择、基于随机碰撞角度的碰撞动力学, 构成了考虑颗粒碰撞的完整多重 Monte Carlo 算法. 对理想工况的细微颗粒流和粗重颗粒流进行了数值模拟, 颗粒碰撞率的模拟结果与理论分析解和 DNS 结果均符合很好, 颗粒场演变的细节信息, 如时间平均和特定时刻的颗粒数密度, 速度和颗粒湍动能等, 均与 DNS 结果符合很好. 数值模拟结果证明该算法不仅具有较低的计算代价, 而且能够达到足够的计算精度.

关键词 颗粒, 碰撞, 多重 Monte Carlo 算法, 计算代价, 计算精度

中图分类号: TK121, O359 **文献标识码:** A **文章编号:** 0459-1879(2005)05-0564-09

引 言

在研究燃烧源超细微颗粒物的生产和生长的机理时, 颗粒的碰撞是一个基本事件和关键事件, 由于颗粒碰撞而导致的凝并(或团聚)以及破碎等是超细微颗粒物生成和生长的重要因素之一^[1]. 颗粒碰撞模型无一例外地都需要耦合到两相流模型中描述颗粒相的模型中去, 因此颗粒碰撞算法也必须耦合到求解颗粒相模型的数值算法中. 颗粒碰撞模型主要有两类, 一类是利用颗粒几何碰撞率来处理颗粒碰撞, 包括是否发生碰撞和碰撞伙伴的寻找, Sommerfeld^[2]在欧拉/拉格朗日两相流模型框架下利用随机轨道的方法来耦合颗粒碰撞模型, 采用 Monte Carlo 算法描述颗粒碰撞, 虚拟碰撞伙伴的选择依据当地颗粒尺度分布函数, 没有考虑两颗发生碰撞的颗粒在碰撞发生的时间步长内有可能不在同一控制容积内演变的事实; Collins^[3]在 DNS 方法中跟踪实际颗粒轨道, 利用颗粒轨道交叉来考虑颗粒碰撞, 能够揭示颗粒碰撞的一些细节和关键参数, 但如用于工程计算, 则计算代价过大; Tsuji 等^[4]利用直接模拟 Monte Carlo(DSMC)算法来处理颗粒碰撞, 但对颗粒相采用离散颗粒模型, 且限制发生碰撞的两颗粒

位于同一控制容积; 另外一类模型是类比空气动力学中分子间碰撞, Pai^[5]在颗粒相的 Boltzmann 方程中考虑颗粒间碰撞作用, 直接求解颗粒相的 Boltzmann 方程从而得到颗粒相的速度分布函数, 但是该类方法的分子碰撞的类比假设限制了其应用范畴.

总结起来, 目前利用颗粒几何碰撞率来处理颗粒碰撞的模型和算法中, 存在如下几个问题: 颗粒碰撞算法所依附的颗粒湍流模型大都采用轨道跟踪的方法, 需要跟踪大量实际颗粒的轨道, 因为实际颗粒数目巨大, 所以计算代价也偏大, 难于应用到工程中; 几乎所有颗粒碰撞算法都认为, 在碰撞发生的时间步长内, 发生碰撞的两颗颗粒在同一控制容积内演变, 这不符合事实. 针对以上问题, 在考虑适当的计算代价和计算精度的前提下, 本文试图发展一种新的 Monte Carlo 算法来考虑颗粒碰撞, 本算法针对以上提到的一些问题进行相应的改进. 本文只讨论二元碰撞.

1 多重 Monte Carlo 算法描述

本文所发展的多重 Monte Carlo(Multi-Monte Carlo, 以下简称 MMC)算法包括两部分, 即描述颗粒相演变的算法和描述颗粒碰撞的算法. 其算法的

2004-06-11 收到第 1 稿, 2005-03-03 收到修改稿.

1) 国家重点基础研究专项经费(2002CB211602)和国家自然科学基金重点项目(90410017)资助.

2) E-mail: klinsmannzhh@163.com

流程如图 1 所示. 对于颗粒相的演变, 为了减少计算代价, 并不采用确定性轨道模型或者随机性轨道模型甚至直接模拟方法 (DNS) 来模拟, 而是采用拉氏 Langevin 方程^[6]来描述颗粒相. 首先对计算区域内的实际颗粒进行处理, 生成代表实际颗粒的虚拟颗粒, 为每颗虚拟颗粒 i 赋予一个数目转换权值 kwt_i . kwt_i 的数值等于虚拟颗粒 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. 因为 Monte Carlo 方法是一种随机取样的方法, 其精度与取样空间内样本数目的平方根成反比, 所以一般应该保持每个控制容积内 $O(10) \sim O(10^2)$ 量级的虚拟颗粒. 拉氏 Langevin 方程描述和跟踪这些虚拟颗粒, 利用 Monte Carlo 算法求解该方程, 具体过程参见文献 [7,8].

对于颗粒之间的碰撞, 采用直接模拟 Monte Carlo 算法 (DSMC) 来考虑, 主要包括虚拟碰撞伙伴的选择、碰撞是否发生的判断以及相应于 DSMC 的颗粒碰撞动力学, 下文将详细阐述这几个问题. 描述颗粒碰撞的 DSMC 算法来源于描述稀薄气体动力学中描述过渡区域的气体分子运动的 DSMC 算法, 其基本物理假设为颗粒稀疏和混沌, 其关键点是在一个足够小的时间步长 Δt 内将颗粒的运动与颗粒的碰撞解耦. 因此, 在一个 Δt 内, 可以首先采用拉氏 Langevin 方程描述颗粒相运动, 包括描述颗粒-流体双向耦合、颗粒脉动等, 然后利用 DSMC 算法计算 Δt 内这些虚拟颗粒间可能发生的碰撞. 正是由于这种解耦关系, 所以本文只对纯粹的颗粒流动进行数值模拟, 对于流体相以及两相耦合, 不在此介

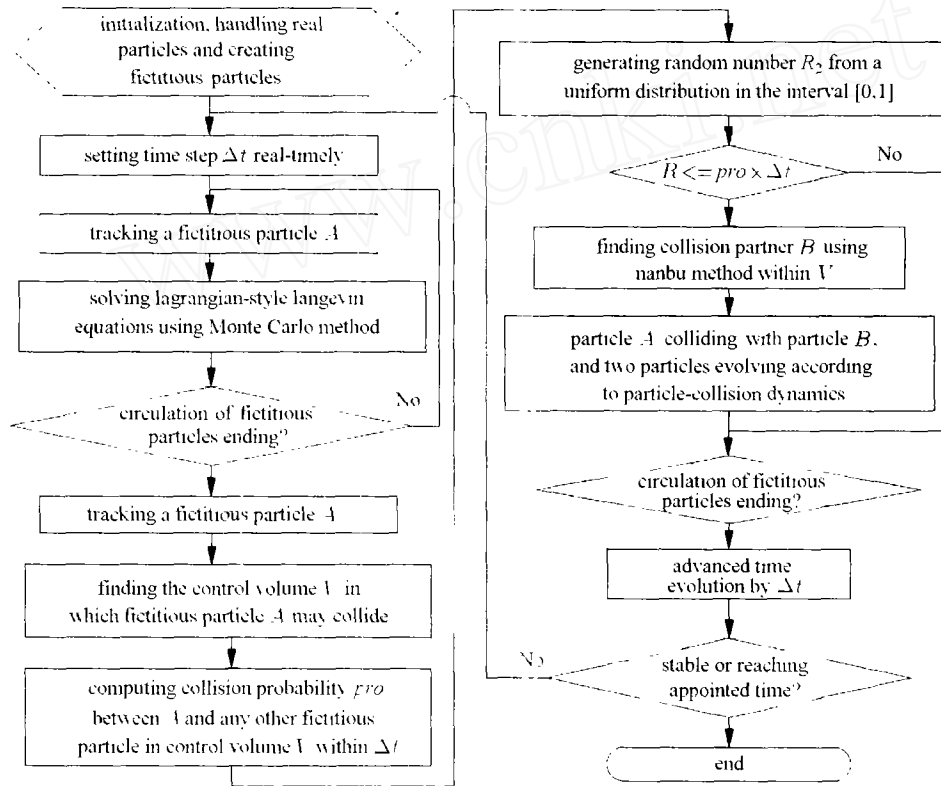


图 1 多重 Monte Carlo 算法流程图

Fig.1 Flow chart and schematic diagram of Multi-Monte Carlo method

绍, 可一并参考文献 [7,8].

1.1 时间步长的计算

因为考虑颗粒之间的碰撞, 对于时间步长的设置, 除了需要满足气固两相流的一般要求外 (小于颗粒自身弛豫时间尺度 τ_p , 流体积分时间尺度 T_c 和流体对控制容积的穿越时间尺度), 还需要另外一些特殊的要求. 设控制容积的边长为 $l_i (i = 1, 2, 3)$, 颗粒

速度的各个分量的最大值为 v_{pi}^{max} , 为了减少检测颗粒碰撞的计算量^[9], 应该确保颗粒在一个时间步长 Δt 内的最大位移小于当前控制容积的任一长度 l_i , 即

$$\Delta t \leq l_i / v_{pi}^{max} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (1)$$

这样, 在 Δt 内, 可能与中心控制容积内的跟踪颗粒发生碰撞的颗粒处于中心控制容积和与之相连的其

它 26 个相邻控制容积内 (二维计算域为 8 个)。

由于涉及到颗粒的碰撞, 对于时间步长的设置来说, 另外一个重要限制条件就是: 必须保证在一个时间步长范围内, 每颗颗粒只可能发生一次碰撞, 这样才不至于遗漏对任何一次颗粒碰撞事件的模拟。在某个控制容积 k (三维情况下 k 可从 1 编号到 27, 二维情况下 k 可从 1 编号到 9) 内, 假设有 N_k 个实际颗粒, N_{fk} 个虚拟颗粒, 那么某虚拟颗粒 i 在控制容积 k 内只发生一次碰撞的碰撞时间为

$$t_{i,col,k} = 1 / \left[\sum_{j=1, j \neq i}^{N_{fk}} (\beta_{ij} \times kwt_j) + \frac{\beta_{ii} \times (kwt_i - 1)}{2} \right] \quad (2)$$

β_{ij} 为序号为 i 和 j 两颗虚拟颗粒的碰撞核 (collision kernel), 其量纲为 $m^3/\#/s$, $\#$ 表示颗粒数目, 碰撞核表示单位时间内 i 和 j 发生一次碰撞事件的概率。

时间步长应该小于等于所有颗粒的碰撞时间中的最小值, 也就是

$$\Delta t \leq 1 / \max_{\forall i, \forall k} \left[\sum_{j=1, j \neq i}^{N_{fk}} (\beta_{ij} \times kwt_j) + \frac{\beta_{ii} \times (kwt_i - 1)}{2} \right] \quad (3)$$

如果颗粒数密度、颗粒粒径或者碰撞核 β_{ij} 在两相流场演变过程中实时改变, 则时间步长必须实时改变。

1.2 虚拟碰撞伙伴所在控制容积的选择

应该注意到, 在时间步长和网格宽度划分合理的情况下, 发生二元碰撞的两颗颗粒在一个时间步长范围内大部分可能位于同一控制容积内, 但是也有可能位于相邻的两个控制容积当中, 特别是网格非均匀、颗粒脉动强烈或者时间步长和网格宽度划分并非最佳等情况下。目前几乎所有的颗粒碰撞模型都认为颗粒碰撞发生在同一控制容积当中, 本 MMC 算法对此进行了改进, 主要思路为: 在虚拟碰撞伙伴的选择中, 首先要确定虚拟碰撞伙伴所在的控制容积, 然后在此控制容积内的所有虚拟颗粒中, 利用 Nanbu 算法^[10] 选择一颗虚拟颗粒作为虚拟碰撞伙伴。

在一个时间步长范围内, 跟踪颗粒与虚拟碰撞伙伴是否位于同一控制容积与以下因素有关: 两颗颗粒各自的速度、时间步长、控制容积长度、网格划分的方法等。这里考虑按照有限容积法来划分网格, 控制容积为立方体, 假设 R_1 为单独生成的满足均匀分布、位于 $[0,1]$ 的随机数, v_{pi} 为跟踪颗粒的速度分量 ($i = 1, 2, 3$), 本文认为判断两颗颗粒位于

同一控制容积的准则如下

$$R_1 \leq \sum_{i=1}^3 (v_{pi} \Delta t / l_i) / 3 \quad (4)$$

否则的话, 虚拟碰撞伙伴以相等概率分布于跟踪颗粒所在中心控制容积周围的 26 个 (二维情况为 8 个) 控制容积中, 此时随机选择一个作为虚拟碰撞伙伴所在的控制容积。

这一判断准则实际上是基于如下思想: 虚拟碰撞伙伴只可能在跟踪颗粒可能到达的范围之内, 假设在整个时间步长内, 只有跟踪颗粒运动, 而其他所有颗粒均冻结静止, 且跟踪颗粒以均匀概率可能位于中心控制容积的任何位置上, 那么在一个时间步长内, 跟踪颗粒在某方向所移动距离的最大值与控制容积在相应方向的长度的比值 $v_{pi} \Delta t / l_i$, 就是两颗颗粒在该方向上均位于同一控制容积的概率, 那么 3 个方向比值的平均值就是两颗颗粒均位于同一控制容积的概率。

当然, 该判断准则显得有些粗糙, 特别是采用冻结的方法, 用跟踪颗粒的速度来代替两颗颗粒速度差, 有点高估了碰撞发生在同一控制容积中的概率, 但是由于此时尚未确定虚拟碰撞伙伴所在控制容积, 更未确定虚拟碰撞伙伴, 所以为了减少计算代价, 仍然采用此判断准则, 下文的数值模拟证明其已经具备一定精度。

1.3 碰撞是否发生的判断

一旦确定了虚拟碰撞伙伴可能所在的控制容积, 接下来需要立即确定跟踪的虚拟颗粒 i 是否会与该控制容积中某颗虚拟颗粒发生一次碰撞事件。假设 R_2 为满足均匀分布、位于 $[0,1]$ 的随机数, 则判断跟踪颗粒 i 在 Δt 内是否会发生一次碰撞事件的数学关系式为

$$R_2 \leq \left[\sum_{j=1, j \neq i}^{N_f} (\beta_{ij} \times kwt_j) + \frac{\beta_{ii} \times (kwt_i - 1)}{2} \right] \times \Delta t \quad (5)$$

此时的 N_f 为已经确定的虚拟碰撞伙伴所在控制容积中虚拟颗粒的数目。

1.4 虚拟碰撞伙伴的选择

利用 Nanbu 算法^[10] 来选择跟踪的虚拟颗粒 i 的虚拟碰撞伙伴。首先计算当前 Δt 内跟踪颗粒 i 与其他某虚拟颗粒 j 发生碰撞的概率 $P_{ij} = kwt_j \times \beta_{ij} \times \Delta t$, 跟踪颗粒 i 内部发生碰撞的概率为 $P_{ii} = [(kwt_i - 1)/2] \times \beta_{ii} \times \Delta t$ 。然后仍然通过随机数 R_2 来

判断与虚拟颗粒 i 发生碰撞的伙伴颗粒 j . 如果以下关系得到满足, 则认为虚拟颗粒 j 为 i 的碰撞伙伴

$$\sum_{n=1}^{j-1} P_{in} \leq R_2 \leq \sum_{n=1}^j P_{in}, \quad j \in [1, N_f] \quad (6)$$

1.5 DSMC 对应的碰撞动力学模型

假设颗粒为刚性球体, 颗粒之间的碰撞为完全弹性碰撞, 不考虑碰撞产生颗粒旋转, 碰撞无黏附和滑移. 球形颗粒 1 和 2 的质量分别为 m_{p1} 和 m_{p2} , 直径分别为 d_1 和 d_2 , 其碰撞前线速度分别为 v_{p1} 和 v_{p2} . 如图 2 所示, 两颗颗粒发生碰撞时, 在碰撞发生处建立新的坐标系 (x', y', z') , 其中, x' 轴与两个相撞的颗粒中心连线共线, y' 轴位于由 x' 轴和两颗粒瞬时速度矢量差 $(v_{p2} - v_{p1})$ 确定的平面内且与 x' 轴垂直; z' 轴则与 y', x' 相垂直. 碰撞后线速度分别为 v_{p1}^* 和 v_{p2}^* .

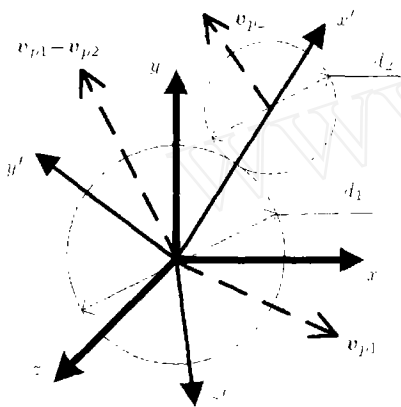


图 2 颗粒碰撞动力学示意图

Fig.2 Schematic diagram for particle-collision dynamics

根据动量守恒定律和能量守恒定律, 碰撞后的颗粒线速度为 [11]

$$\left. \begin{aligned} v_{p1,x'}^* &= v_{p1,x} - J_{x'} / m_{p1} \\ v_{p1,y'}^* &= v_{p1,y}, \quad v_{p1,z'}^* = v_{p1,z} \\ v_{p2,x'}^* &= v_{p2,x} + J_{x'} / m_{p2} \\ v_{p2,y'}^* &= v_{p2,y}, \quad v_{p2,z'}^* = v_{p2,z} \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

其中 $J_{x'} = -(v_{p2,x} - v_{p1,x})(2m_{p1}m_{p2}) / (m_{p1} + m_{p2})$

然后再把新坐标系 (x', y', z') 转换到原来的坐标系 (x, y, z) , 得到碰撞之后的以原坐标系 (x, y, z) 表示的颗粒线速度. 这时需要确定碰撞瞬间颗粒的具体接触位置才能进行坐标转换. 如图 3 所示, A, B 分别为颗粒 1, 2 的中心质点位置, AB 线段长度即

为两颗粒中心距离, 总是保持为 $(d_1 + d_2) / 2$. 点 A, B 所在的平面 Plane 1 和 Plane 2 垂直, BC 垂直于 Plane 1, AD 垂直于 Plane 2. AE 与 DC 平行, AB 与 AD, AC 和 AE 的夹角分别为 a_1, a_2 和 a_3 , 3 个角之间的关系可以推导如下

$$\cos(a_3) = (|\sin^2(a_1) - \sin^2(a_2)|)^{1/2} \quad (8)$$

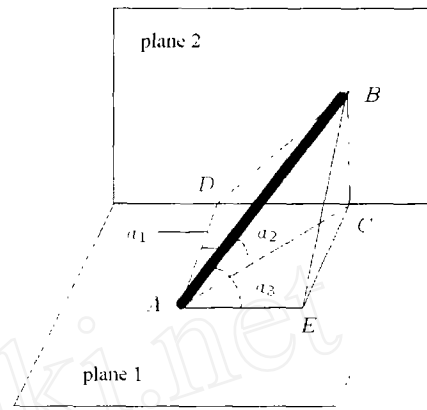


图 3 颗粒碰撞位置示意图

Fig.3 Schematic diagram for particle-collision position

在颗粒碰撞发生时刻, 两个直径一定的球形颗粒相切接触, 只要确定以上 3 个角度之中的任两个角度, 就可以确定两个球体碰撞的具体接触位置. 用 Monte Carlo 方法来考虑颗粒碰撞时, 采用的是随机方法, 认为两个球形颗粒在碰撞瞬间的具体接触位置是随机的, 所以, 假设 a_1 和 a_2 为 $0^\circ \sim 360^\circ$ 之间满足均匀分布的两个随机数, 根据式 (8) 求出 a_3 , 就可以确定颗粒碰撞的具体接触位置, 从而可以进行坐标系转换.

2 多重 Monte Carlo 算法验证

2.1 计算工况

根据颗粒自身的弛豫时间尺度 τ_p 与 Kolmogorov 时间尺度 τ_k , 流体积分时间尺度 T_e 之间的大小关系, 可以把颗粒形象地分为细微颗粒 ($\tau_p \ll \tau_k$), 有限惯性颗粒 ($\tau_k < \tau_p < T_e$) 和粗重颗粒 ($\tau_p \gg T_e$). 细微颗粒完全追随流体运动, 也可称为无惯性颗粒, 颗粒碰撞受小尺度湍流耗散涡团和颗粒的相互作用的影响; 粗重颗粒则完全不受流体的影响, 颗粒之间相互独立而不存在任何关联, 类似于稀薄气体分子做混乱无序的自由分子运动, 颗粒碰撞受大尺度湍流含能涡团的作用. 这实际上是两种极限的理想情况, 实际颗粒流通常是有限惯性颗粒, 一方面流

体对颗粒的运动有影响, 另外一方面, 颗粒本身存在惯性, 颗粒之间相互关联, 颗粒碰撞与湍流小尺度耗散涡团和大尺度含能涡团都相关^[12].

颗粒间的平均碰撞率是指在单位时间内单位体积的计算域中颗粒间发生碰撞的次数, 它是描述颗粒碰撞的一个关键参数, 对于细微颗粒如气溶胶、燃烧源可吸入颗粒物的凝并等尤为重要. 本文通过模拟细微颗粒和粗重颗粒的运动来检验 MMC 算法.

2.1.1 细微颗粒流

简单剪切流中的轻颗粒完全随流体运动, 颗粒速度等于颗粒周围流体的速度. 如果颗粒大小相同, 颗粒直径为 d_p , 颗粒数密度为 n , 流体的剪切率为 γ , 颗粒均匀分布在计算域中, 计算域在 3 个方向都是周期性的. 颗粒的剪切运动在 x, y 向上是周期性的, 在 z 向非周期性的, Wang Lianping^[13] 得到平均碰撞率 N_c (量纲为 $\#/(m^3 \cdot s)$) 为

$$N_c = 0.5n^2(4\gamma d_p^3/3)(1 - 3\pi d_p/(16l)) \quad (9)$$

其中 l 是颗粒在 z 向上的分布范围, 这里 $l = \pi$. 碰

撞核 $\beta = (4\gamma d_p^3/3)(1 - 3\pi d_p/(16l))$. 初始条件见表 1.

2.1.2 粗重颗粒流

同样考虑单分散性颗粒, 计算域 3 个方向都周期性, 颗粒运动也在 3 个方向是周期性的. 当颗粒均匀分布且速度满足麦克斯韦分布时, Abrahamsam^[14] 得到平均碰撞率为

$$N_c = 0.5n^2 d_p^2 (16\pi \langle v_p^2 \rangle / 3)^{1/2} \quad (10)$$

其中 $\langle v_p^2 \rangle$ 是颗粒脉动速度的均方值. 碰撞核为 $\beta = d_p^2 (16\pi \langle v_p^2 \rangle / 3)^{1/2}$.

粗重颗粒的模拟的初始条件如表 1 所示. 表中计算区域、颗粒大小、颗粒速度均为无量纲化参数.

需要指明的是, 由于假设颗粒之间仅仅发生完全弹性碰撞, 在本文的特殊工况中, 颗粒整体数目和颗粒大小均不会发生变化, 故碰撞核在每个时间步长内都不会发生变化, 因此最小碰撞时间也不会发生变化, 所以不需要在每一步颗粒演变前都计算和更新时间步长.

表 1 细微颗粒流和粗重颗粒流的初始条件

Table 1 Initial parameters of fine particles and heavy particles

Initial parameters	Fine particles	Heavy particles
boundary condition	$0 < x < 2\pi, 0 < y < 2\pi$ $0.5\pi < z < 1.5\pi$	$0 < x < 2\pi, 0 < y < 2\pi$ $0 < z < 2\pi$
the number of cell	16^3	16^3
shear rate, γ (s^{-1})	60	—
particle velocity distribution	$u(x, y, z) = \gamma z, v(x, y, z) = 0$ $w(x, y, z) = 0$	Maxwell distribution, $\langle v_p^2 \rangle \approx 3$
the maximum of particle velocity, v_{pi}^{max} (m/s)	282.743	4
the total number of particle, N	10^5	10^5
particle diameter, d_p	0.01	0.01
the maximum of time step, Δt_{max} (s)	0.0014	0.098
collision kernel, β ($m^3/particles/s$)	7.985×10^{-5}	7.09×10^{-4}
the minimum of collision time scale (s)	0.2506844	0.028204
time step, Δt (s)	0.001	0.005
time evolution, T (s)	0.1	0.5

另外, 由于本 MMC 算法的描述对象为颗粒, 为了比较对象更有针对性和简单起见, 本文中所有数值模拟均不计算流体相以及颗粒与流体之间的两相耦合. 本文选择的两种工况正好都可把剥离流体相细节信息、把焦点集中于颗粒相及颗粒-颗粒碰撞之上.

在本文中, 非均匀网格采用的是渐密模式, 相

邻网格宽度的比值为 1.04, 下文如不特别指明, 都采用均匀网格. 两种工况中, MMC 算法中的虚拟颗粒数目都取为 80000, 平均每个控制容积中虚拟颗粒数目大约 20 个, 实际颗粒数目大约为 25 个. 实际上, 虚拟颗粒和实际颗粒数目的比值完全可以更小一些, 只是由于 DNS 算法难以模拟数目更多的实际颗粒, 且 MMC 算法要求每个控制容积中虚拟颗粒

数目应该达到 $O(10) \sim O(10^2)$ ，所以本算例对此体现不够充分。对颗粒碰撞进行模拟的 DNS 算法的详细描述请参照文献 [9]。限于篇幅在此不再详述。

2.2 颗粒平均碰撞率的验证

对于两种计算工况，利用 MMC 算法及 DNS 均对颗粒平均碰撞率进行了数值模拟，并与理论值比较，结果如表 2。由表 2 可知，DNS 结果的证明，发生二元碰撞的两颗颗粒在一个时间步长范围内确实有可能不位于同一控制容积内，所以在 Monte Carlo 方法考虑颗粒碰撞的算法当中，不能仅仅局限虚拟碰撞伙伴与跟踪颗粒都位于中心控制容积，而应扩展到包括中心控制容积的 27 个（二维情况为 9 个）

控制容积当中去选择。但是，发生在中心控制容积中的碰撞概率远远大于发生在其他 26 个（二维情况为 8 个）中任一控制容积的概率，甚至远远大于发生在所有相邻控制容积中的概率之和。为了体现该事实，首先判断虚拟碰撞伙伴所在的控制容积应该是较好的办法，我们提出的判断准则对于均匀网格和非均匀网格都适用，基本上与 DNS 的细观模拟结果吻合，已经具备一定的精度。应该指出的是，在工程计算中，网格划分较稀疏，导致一个时间步长内颗粒运动距离远远小于控制容积的长度，所以绝大部分颗粒的碰撞都发生在同一控制容积内，故以往研究者的简化处理也基本准确。

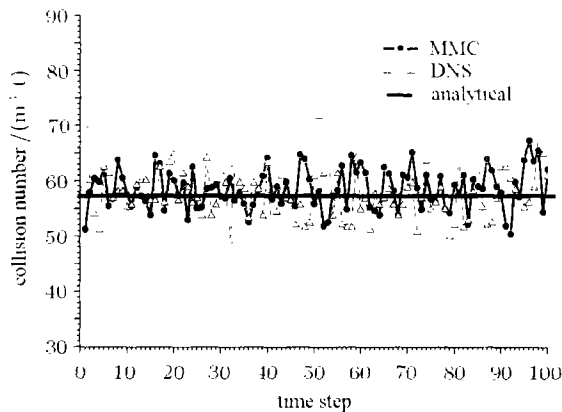
表 2 颗粒平均碰撞率的 Monte Carlo 结果、DNS 结果及理论值的比较

Table 2 Comparison between MMC methods solution, DNS solution and analytical solution of particle collision rate

Results	The average collision rate (# / s (m ³) ⁻¹)	Relative error (%)	The number probability of collision occurring in the same cell
MMC solution (fine particles)	25.047	-3.498	0.557
DNS solution (fine particles)	26.039	0.323	0.473
analytical solution (fine particles)	25.955	—	—
MMC solution(uniform cell, heavy particles)	59.083	2.619	0.960
DNS solution(uniform cell, heavy particles)	57.584	0.014	0.956
MMC solution(nonuniform cell, heavy particles)	60.067	4.327	0.957
DNS solution(nonuniform cell, heavy particles)	57.666	0.156	0.955
analytical solution (heavy particles)	57.576	—	—

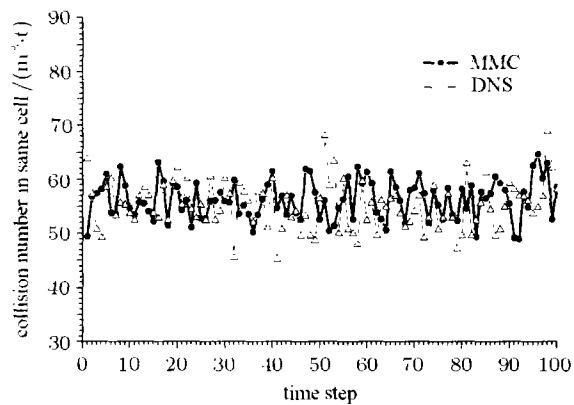
图 4 为在每个时间步长内，MMC 算法检测的与 DNS 检测的颗粒碰撞率的实时比较。计算工况为

粗重颗粒流，均匀网格。整体而言，MMC 算法的结果是令人满意的。



(a) 碰撞次数

(a) The number of collision vs. time



(b) 发生在同一网格内的碰撞次数

(b) The number of collision occurring in same cell vs. time

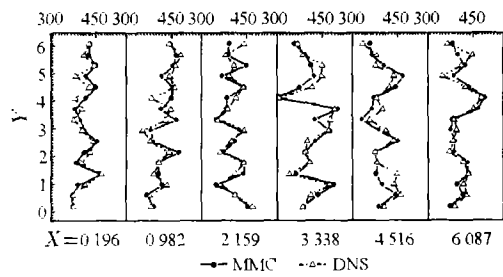
图 4 MMC 算法与 DNS 模拟的颗粒碰撞率的实时比较

Fig.4 Real-time comparison between MMC solution and DNS solution of particle collision frequency

2.3 单分散性颗粒细观、宏观分析比较

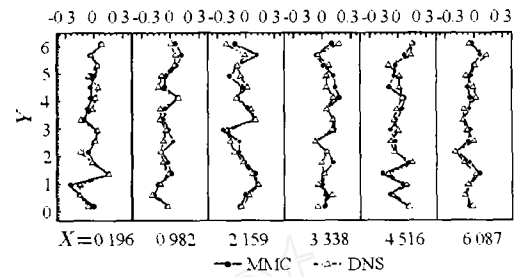
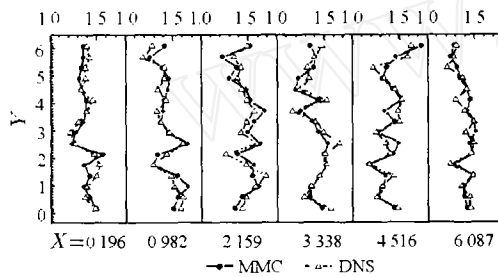
为了进一步检查 MMC 算法, 我们把能够反映颗粒碰撞细节信息的 DNS 模拟结果作为标准, 对于完全相同的计算工况, 用 MMC 算法的颗粒场模拟结果与 DNS 模拟结果作比较, 这里选择表 1 中的粗重颗粒流作为对照工况. 为了进行细节信息的定量比较, 对定截面上的颗粒数密度、颗粒平均速度和颗粒

湍动能的时间平均值和特定时刻值进行比较, 这里定截面为 z 方向的中心截面 ($z = \pi$), 特定时刻选取第 50 个时间步长那个时刻 ($t = 0.25$ s). 数值模拟结果如图 5, 由图 5 可知 MMC 与 DNS 的结果均符合非常好. 进一步验证了 MMC 算法不仅在碰撞率这个宏观指标上表现合格, 对于细节的颗粒场信息也能够模拟很好, 这充分验证了该多重 Monte Carlo



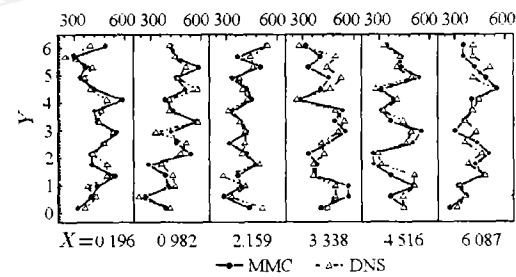
(a) 时间平均的颗粒数密度

(a) Time-averaged particle number density

(b) 时间平均的 x 向颗粒速度(b) Time-averaged particle velocity of x direction

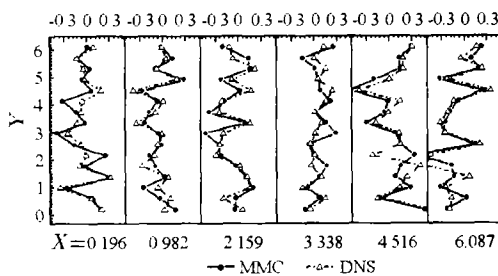
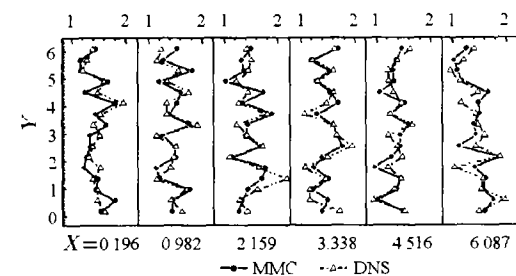
(c) 时间平均的颗粒湍动能

(c) Time-averaged particle turbulent kinetic energy



(d) 特定时刻的颗粒数密度

(d) Particle number density on the special time-step

(e) 特定时刻的 x 向颗粒速度(e) Particle velocity of x direction on the special time-step

(f) 特定时刻的颗粒湍动能

(f) Particle turbulent kinetic energy on the special time-step

图 5 考虑碰撞的 MMC 与 DNS 模拟的颗粒场结果细观比较

Fig.5 Microcosmic comparison between MMC solutions and DNS solutions of monodisperse particle dynamics

算法.

在计算代价方面, 对于均匀网格下粗重颗粒流的工况, 同一台微机上, 改进的 DNS 算法^[9]的计

算代价为 296 s, 而 MMC 算法则为 68 s. 计算代价的大幅度降低一方面来源于 MMC 算法跟踪比实际颗粒数目少的虚拟颗粒, 另一方面来源于在考虑颗粒

碰撞方面, DSMC 算法基于随机过程来判断碰撞事件是否发生、选择虚拟碰撞伙伴、确定碰撞位置, 而 DNS 算法却需要得到全部的确切信息, 显然, 前者要省时得多. 不仅如此, 相比较于那些耦合了碰撞算法的随机轨道模型或确定性轨道模型, 由于跟踪虚拟颗粒, MMC 算法的计算代价也要小一些, 而且实际颗粒数目越多, 计算代价方面的优势越明显.

实际上, MMC 算法由于能够得到颗粒的轨道经历效应和历史效应等, 故能准确模拟颗粒碰撞, 即使是相对颗粒体积分分数很小的情况 (文中细微颗粒流和粗重颗粒流的体积分分数分别约为 0.134% 和 0.067%), 也能准确模拟颗粒碰撞之后的平均速度、脉动速度、速度关联、颗粒数密度等. 另外, MMC 算法可以进而扩展到考虑非弹性碰撞、由于碰撞而导致的凝并、破碎等事件; 还可以方便地耦合进入两相流模型中, 直接从气相模型中取得气相场的各种信息, 用于颗粒相的求解以及颗粒尺度分布函数的求解. 需要强调的是, MMC 算法需要预先设定的碰撞核模型来考虑判断颗粒碰撞的发生. 这个模型对于计算结果的影响至关重要.

值得注意的是, 由于在一个时间步长 Δt 内颗粒的运动与颗粒的碰撞是解耦的, 所以求解描述颗粒运动的拉氏 Langevin 方程的 Monte Carlo 算法可以与求解颗粒碰撞的 DSMC 算法解耦, 因此本文中所描述的 DSMC 算法可以从 MMC 算法中单独剥离出来. 如对于稠密气固两相流, 本文中描述稀疏气固两相流的拉氏 Langevin 方程并不适合, 可以把该 DSMC 算法与其他求解稠密颗粒相湍流模型的数值算法耦合起来. 另外, 本文中描述的 DSMC 算法只适合于二元碰撞, 但是由于 DSMC 算法并不依赖于逆碰撞假设^[15], 因而可以应用于稠密两相流中可能存在的三元碰撞这样复杂的工况, 但是需要对 DSMC 算法进行进一步的改进.

3 结 论

通过本文的工作, 可作出如下结论:

(1) 所发展的 MMC 算法是可行的, 平均碰撞率的模拟结果与理论计算值和 DNS 结果都符合甚好, 颗粒场的细节信息如浓度场、速度场等与 DNS 符合很好;

(2) 该算法反映了发生二元碰撞的两颗颗粒有可能不位于同一控制容积的事实, 且该算法对此所模拟工况的统计结果与 DNS 的统计结果基本符合;

(3) 新的 MMC 算法在满足足够的数值计算精度

的前提下, 大大减少了计算代价;

(4) 该 MMC 算法不仅可以用于普通粗颗粒的两相流的模拟, 也可以求解超细微颗粒物的湍流经历, 可以在此基础上考虑颗粒碰撞导致的凝并、破碎, 以及其他的事件如成核、沉积、冷凝 / 蒸发等, 求解超细微颗粒物的通用动力学方程 (GDE). 这是我们正在开展的工作之一.

参 考 文 献

- 1 Yousif S, Lockwood FC, Abbas T. Modelling of toxic metal emissions from solid fuel combustors. Twenty-Seventh Symposium International on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, 1998, 1654
- 2 Sommerfeld M. Validation of a stochastic Lagrangian modelling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence. *International Journal of Multiphase Flow*, 2001, 27: 1829~1858
- 3 Reade WC, Collins LR. A numerical study of the particle size distribution of an aerosol undergoing turbulent coagulation. *J Fluid Mech*, 2000, 415: 45~64
- 4 Tsuji Y, Tanaka T, Yonemura S. Cluster patterns in circulating fluidized beds predicted by numerical simulation (discrete particle model versus two-fluid model). *Powder Technology*, 1998, 95: 254~264
- 5 Pai SI. Fundamental equations of a mixture of a gas and small spherical solid particles from simple kinetic theory. *Rev Roum Sci Tech Mech Appl*, 1974, 19: 605~621
- 6 Simonin O. Continuum modelling of dispersed turbulent two-phase flows. In: VKI Lectures Series Monographs, Combustion & Turbulence, Combustion and Turbulence in Two-Phase Flows. Brussels, Belgian, Jan. 29-Feb. 2, 1996
- 7 Liu ZH, Zheng CG, Zhou LX. A second-order-moment-Monte-Carlo (SOM-MC) model for simulating swirling gas-particle flows. *Powder Tech*, 2001, 120(3): 216~222
- 8 赵海波, 柳朝晖, 郑楚光等. 湍流两相流的脉动速度联合 PDF 输运方程. *力学学报*, 2002, 34(5): 675~681 (Zhao Haibo, Liu Zhaohui, Zheng Chuguang, et al. A joint fluctuation velocity PDF transport equation of two-phase flows. *Acta Mechanica Sinica*, 2002, 34(5): 675~681(in Chinese))
- 9 陈胤密, 柳朝晖, 郑楚光. 颗粒碰撞的直接模拟算法研究. *计算物理*, 2004, 21(5): 421~426 (Chen Yinmi, Liu Zhaohui, Zheng Chuguang. Direct numerical simulation method of inter-particle collision. *Chinese Journal of Computational Physics*, 2004, 21(5): 421~426 (in Chinese))
- 10 Nanbu K. Direct simulation scheme derived from the Boltzmann equation. I. Monocomponent gases. *J Phys Soc Jpn*, 1980, 49: 2042~2049
- 11 Lun CKK. Numerical simulation of dilute turbulent gas-solid flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 2000, 26: 1707~1736
- 12 Alipchenkov VM, Zaichik LI. Particle collision rate in turbulent flow. *Fluid Dynamics*, 2001, 36(4): 608~618

- 13 Wang LP, Wexler AS, Zhou Y. On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. I. Zero-inertial case. *Phys Fluids*, 1998, 10: 266~276
- 14 Abrahamson J. Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid. *Chem Eng Sci*, 1975, 30: 1371~1379
- 15 沈青. 稀薄气体动力学. 北京: 国防工业出版社, 2003(Shen Qing. Rarefied Gas Dynamics. Beijing: National Defence Industry Press, 2003(in Chinese))

MULTI-MONTE CARLO METHOD FOR INTER-PARTICLE COLLISION¹⁾

Zhao Haibo²⁾ Zheng Chuguang Chen Yinmi

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

Abstract In the interest of improving collision arithmetic and decreasing computation cost, a new Multi-Monte Carlo (MMC) method for inter-particle collision is promoted. The particle motion is described by the Langevin equations, which are solved by Monte Carlo (MC) method. On the same time, inter-particle collision is modeled by Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method, which is coupled with the forenamed MC method. The simulation particles of MMC method are fictitious particles, the number of which is far less than that of real particles. In order to found an integrated MMC method for inter-particle collision, a series of methods are developed, which include the setting of time step, the judgment of control volume in which fictitious collision partner lies, the judgment of the occurrence of inter-particle collision event, the choice of fictitious collision partner, and particle collision dynamics based on stochastic collision angle. Fine particles flows and heavy coarse particles flows are chosen as standard cases to validate MMC method. The simulation results of MMC method are in good agreement with that of both analytical solution and Direct Numerical Simulation (DNS), not only on macroscopical facets such as particle collision frequency, but also on microcosmic facets such as time-averaged or special-time-point particle number density, particle velocity and particle turbulent kinetic energy etc. The results of numerical simulation show that MMC method for inter-particle collision has not only enough low computation cost but also enough high computation precision.

Key words particle. collision, Multi-Monte Carlo method, computation cost, computation precision

Received 11 June 2004, revised 3 March 2005.

1) The project supported by the National Key Basic Research and Development Program (2002CB211602) and the National Natural Science Foundation of China (90410017).

2) E-mail: klinsmannzhhb@163.com