

水滴清除气溶胶过程的随机算法和数值模拟*

赵海波, 郑楚光

(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: 气溶胶尺度分布的时间演变可量化气溶胶的湿沉降过程, 它在数学上可由考虑湿沉降的通用动力学方程来描述。该方程为一典型的部分积分微分方程, 与气溶胶尺度分布和雨滴尺度分布均相关, 且由于需要考虑 Brown 扩散、拦截和惯性碰撞等湿沉降机制而使得清除系数模型非常复杂, 普通的数值方法难以求解。为此发展了一种新的多重 Monte Carlo 算法, 以求解考虑湿沉降的通用动力学方程, 并用于模拟实际环境中气溶胶的湿沉降。对于对数正态分布的气溶胶尺度分布和雨滴尺度分布, 多重 Monte Carlo 算法进行的数值模拟表明, 雨滴几何平均尺度越小, 雨滴几何标准偏差越小, 越有利于小尺度和中等尺度气溶胶的湿去除, 而稍微不利于大尺度气溶胶的湿去除。

关键词: 湿去除; 气溶胶; 降雨; Monte Carlo 算法; 数值模拟

中图分类号: O357.5;TK121 文献标识码: A

引 言

降雨过程是清除大气中气溶胶的一种主要形式, 气溶胶湿沉降的过程就是尺度较小的气溶胶与雨滴碰撞被捕集的过程。随着气溶胶不断被雨滴所清除, 气溶胶的尺度分布将发生变化, 可以利用考虑湿沉降的通用动力学方程 (general dynamic equation, GDE) 来描述气溶胶尺度分布的时间演变过程^[1]:

$$\partial n_p(d_p, t) / \partial t = - \Lambda(d_p) n_p(d_p, t), \quad (1)$$

其中 $n_p(d_p, t)$ 为气溶胶尺度分布函数 ($(N/\mu\text{m})/\text{m}^3$, N 表示颗粒数目), 表示时刻 t 、尺度为 d_p (一般为 μm) 的气溶胶在单位体积内 (一般为 m^3) 的数目浓度; $\Lambda(d_p)$ 称为清除系数 (scavenging coefficient) 或沉积核 (deposition kernel), 表示气溶胶 (d_p) 被雨滴所清除的速率 ($1/\text{s}$)。把各种气溶胶湿沉降机制囊括进入清除系数的模型是广泛采用的研究方法^[1~5]。清除系数描述了气溶胶 (d_p) 与任何尺度的雨滴碰撞而被捕集的过程, 其表达式为^[1]:

$$\Lambda(d_p) = \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} K(d_p, D_d) E(d_p, D_d) dD_d, \quad (2)$$

* 收稿日期: 2005_04_29; 修订日期: 2006-07-10

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重点项目 (90410017)

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

其中 $K(d_p, D_d)$ 为碰撞核(collision kernel)或捕集核(collection kernel), 表示气溶胶颗粒(d_p)与雨滴颗粒(D_d)在同一时刻几何轨道发生交叉而碰撞的概率, $K(d_p, D_d) = \pi D_d^2 |U(D_d) - U(d_p)| n_d(D_d)/4$, 其中 $n_d(D_d)$ 为雨滴尺度分布函数($(N/mm)/m^3$), $U(D_d)$ 和 $U(d_p)$ 分别为雨滴(D_d) 和气溶胶(d_p) 的末速度; $E(d_p, D_d)$ 为碰撞效率, 表示实际发生的碰撞次数与理论上将要发生的碰撞次数的比例, 这是由于湍流扩散、Brown 扩散、范德华力、热泳、静电吸附等因素所引起的气溶胶和雨滴的轨迹滑移, 所以碰撞效率可以集中体现各种气溶胶湿沉降机制, 如最为重要的 Brown 扩散(Brownian diffusion)、拦截(interception)、惯性碰撞(inertial impaction)和静电捕集(electrostatic collection)等机制。

通过求解方程(1)可以定量获取降雨过程中气溶胶尺度分布(ASD)的细节信息。如果 ASD 满足单分散性或特殊函数形式(如指数、对数正态和 Γ 函数等)的分布, 且清除系数 $\Lambda(d_p)$ 为颗粒尺度 d_p 的简单函数, 则方程(1)存在指数形式的理论分析解^[6]。但是对于某些具有复杂分布的多分散性气溶胶群或者 $\Lambda(d_p)$ 较为复杂, 则对于方程(1)这个典型的部分积分微分方程, 不仅很难在数学上得到理论解, 而且普通的数值方法或者难以求解或者存在较大的离散误差。

Jung 等^[7]发展矩方法在全气溶胶尺度范围内求解 GDE, 计算效率高, 可定量得到 ASD 的时间演变过程, 但是矩方法存在如下局限性: (a) ASD 和雨滴尺度分布(RSD)必须为特殊函数形式, 如对数正态分布和 Gamma 分布等; (b) 必须作一些假设或简化, 以使得碰撞效率的模型成为气溶胶尺度的指数的函数; (c) 假设在演变过程中 ASD 始终具有“自保持”(self-preserving)特点; (d) 所建立的矩方程组极为复杂, 不易求解。这些局限性限制了其应用范围。另外, 分区法^[8]也广泛用于气溶胶动力学, 并具有一定的计算精度和恰当的计算代价, 但它算法复杂, 且由于不能得到颗粒的轨道经历效应和历史效应而难以处理复杂颗粒演变过程。

描述气溶胶湿沉降过程的难点在于该过程与复杂的 ASD 和 RSD 均相关, 而对 ASD 和 RSD 进行数值积分和微分必将耗费大量计算代价或造成一定的数值误差。实际上, 气溶胶群和雨滴群均为离散系统, 而 Monte Carlo(MC)方法具有天生的离散特性, 特别适合于离散系统以及其所发生的离散湿沉降事件。在 MC 模拟过程中, 跟踪一定数量的样本的演变过程, 这些样本发生湿沉降事件的概率正比于这些事件发生的速率。基于时间驱动(time-driven)MC 算法^[9]在恰当的时间步长内认为所有动力学事件互相解耦和相互独立, 而基于事件驱动(event-driven)MC 算法^[10]依据已知的事件概率(通过对应过程的平均速率计算得到)来随机选定可能发生的事件类型和计算事件间的时间间隔; 常体积 MC^[9-11]在离散系统动力学演变过程中保持计算区域体积不变, 其代价是计算区域内模拟颗粒数目的不断变化, 而常数目 MC^[12]通过不断收缩或扩展计算区域来保持其内模拟颗粒数目不变。作者^[13-19]发展了一种新的多重 Monte Carlo (multi-Monte Carlo, MMC) 算法来描述离散系统动力学演变过程, 它同时具有基于时间驱动(time-driven)MC、常体积 MC 和常数目 MC 的特点。本文简单介绍了描述气溶胶湿沉降过程的 MMC 算法, 并利用其进行数值模拟从而分析雨滴尺度分布对气溶胶湿去除效果的影响。

1 考虑气溶胶湿沉降的多重 Monte Carlo 算法简单描述

本文考虑的气溶胶的湿沉降过程基于如下简化或假设: 降雨过程稳定; 雨滴尺度远远大于气溶胶尺度, 且雨滴尺度谱保持稳定; 雨滴和气溶胶颗粒均为球形颗粒。

1.1 考虑湿沉降的 MMC 算法流程

MMC 算法基于时间驱动 Monte Carlo 技术^[9], 在一个可调整的时间步长内, 跟踪每一颗离

散的气溶胶颗粒。流程如下:

(A) 生成加权的虚拟气溶胶颗粒,代表数目大得多的实际气溶胶群;生成加权的虚拟雨滴,代表数目大得多的实际雨滴颗粒。

(B) 时间步长循环:

() 计算最小湿沉降时间尺度,实时设置时间步长 Δt ;

() 虚拟气溶胶循环:对于每一颗虚拟气溶胶,利用随机数判断其在 Δt 内是否将发生湿沉降,记录每一次湿沉降事件;

() 对每一个检测到的湿沉降事件,处理其后果,同时保持虚拟气溶胶颗粒总数目不变和计算区域体积不变。

(C) 在指定时间输出数值模拟结果。

1.2 引入加权的虚拟气溶胶和虚拟雨滴

在 MMC 算法中,认为一组体积相同或者相近的实际气溶胶颗粒具备同样的属性和行为,这些实际气溶胶由一颗或几颗“虚拟颗粒”(本文称为“虚拟气溶胶”)代表,虚拟气溶胶是这些实际气溶胶的指示器,虚拟气溶胶的演变过程可以代表计算区域内实际气溶胶的演变过程。简单来说,每类实际气溶胶可以由若干个虚拟气溶胶代表,虚拟气溶胶的尺度就是这些实际气溶胶的代表尺度,不同类的虚拟气溶胶具有不同的数目权值 w_p ,但是同类的虚拟气溶胶具有相同的数目权值, w_p 的值就是这颗虚拟气溶胶所代表的当地实际气溶胶的个数。一般来说, w_p 的值达到 $O(10^3) \sim O(10^4)$ 量级仍然可以保持 MMC 算法较高的计算精度。生成虚拟颗粒的详细描述和示例可以参照文献[13]。在系统演变过程中,针对所发生的气溶胶湿沉降事件,改变相关虚拟气溶胶的数目权值和尺度,来达到同时保持计算区域体积和虚拟气溶胶总数目不变的目的。

清除系数的计算中需要对 RSD 进行积分,这种积分计算可能耗费大量的计算代价或者造成一定的数值误差,甚至完全无法求解。为了避免这个积分计算,类似于虚拟气溶胶,本文引入加权的虚拟雨滴的概念,生成虚拟雨滴的步骤也完全类似于虚拟气溶胶的生成步骤。这样编号为 i 的虚拟雨滴拥有一个数目权值 w_{di} ,其尺度为 D_{di} ,代表相应数目、相应尺度的实际雨滴,虚拟雨滴总数目为 N_{df} 。此时清除系数的计算如下:

$$\Lambda(d_p) = \int_{D_{d,\min}}^{D_{d,\max}} \frac{\pi D_d^2}{4} |U(D_d) - U(d_p)| E(d_p, D_d) n_d(D_d) dD_d = \sum_{i=1}^{N_{df}} \left[\frac{\pi D_{di}^2}{4} |U(D_{di}) - U(d_p)| E(d_p, D_{di}) w_{di} \right] \quad (3)$$

1.3 时间步长的设置

虚拟气溶胶 i 的清除系数 Λ_i 代表单位时间内虚拟气溶胶 i 发生一次湿沉降事件的概率,所以其发生一次湿沉降事件的时间尺度为 $t_{sca,i} = 1/\Lambda_i$ 。基于时间驱动^[9]的 MMC 算法的时间步长应该小到任何虚拟气溶胶均只可能最多发生一次湿沉降事件,这样可以不遗漏任何一次湿沉降事件。所以时间步长 $\Delta t \leq \min(t_{sca,i}) = 1/\max(\Lambda_i)$ 。

1.4 MMC 算法对湿沉降事件是否发生的判断

假设 R_1 为满足均匀分布、位于 $[0, 1]$ 的随机数,对于虚拟气溶胶 i ,如果 $R_1 \leq \Lambda_i \Delta t$,则认为其将发生湿沉降事件。因为时间驱动 MC 方法^[9]认为当前时间步长之内发生的事件只会对下一个时间步长内的气溶胶动力学演变过程产生影响,所以直到所有虚拟气溶胶遍历完毕之后才处理所有的湿沉降事件后果。

1.5 MMC 算法对湿沉降事件的后果处理

假如虚拟气溶胶 i 发生了湿沉降事件, 则在下一个时间步长内它将不再被跟踪, 其空缺应该被填充以保持常数目。此时通过一个随机过程从虚拟气溶胶数列中选取一颗虚拟气溶胶 j , 把虚拟气溶胶 j 分裂成两颗虚拟气溶胶 k 和 m , $w_{ij} = 2w_{pk} = 2w_{pm}$, 且 $d_{pj} = d_{pk} = d_{pm}$, 其中 w_{ij} 、 w_{pk} 和 w_{pm} 为相应的虚拟气溶胶的数目权值, d_{ij} 、 d_{pk} 和 d_{pm} 为相应的虚拟气溶胶的尺度; 把虚拟气溶胶 k 和 m 分别取代虚拟气溶胶 i 和 j 。这些处理实际上相当于把一个随机选择的虚拟气溶胶的一半来填充湿去除事件所留下的空缺。

2 数值模拟

受 Brown 扩散所主导的、较小尺度的气溶胶的湿沉降过程存在理论分析解^[6], MMC 算法已经与其进行的比较表明, 具有较高且稳定的计算精度^[15]。本文主要采用 MMC 算法研究真实环境中气溶胶湿沉降过程与雨滴尺度谱之间的关系。气溶胶湿沉降的主要机制为 Brown 扩散、拦截和惯性碰撞, Slinn^[20] 发展了半经验的碰撞效率公式来描述这 3 个机制:

$$E(d_p, D_d) = \left\{ \frac{4}{Re Sc} [1 + 0.4Re^{1/2} Sc^{1/3} + 0.16Re^{1/2} Sc^{1/2}] \right\}_{\text{Brownian diffusion}} + \left\{ 4 \frac{d_p}{D_d} \left[\frac{\mu_a}{\mu_w} + (1 + 2Re^{1/2}) \frac{d_p}{D_d} \right] \right\}_{\text{interception}} + \left\{ \left[\left(\frac{\rho_w}{\rho_p} \right)^{1/2} \left(\frac{St - S^*}{St - S^* + 2/3} \right)^{3/2} \right] \right\}_{\text{inertial impaction}} \quad (4)$$

其中 Re 为基于雨滴半径的雨滴 Reynolds 数, $Re = D_d U(D_d) \rho_a / (2\mu_a)$, 其中 ρ_a 和 μ_a 分别为大气密度和动力粘度; 雨滴末速度采用依据试验结果拟合的三段式公式计算^[21]: 如果 $D_d < 100 \mu\text{m}$, $U(D_d) = 30.75 D_d^2 \times 10^6$; 如果 $100 < D_d < 1000 \mu\text{m}$, $U(D_d) = 3.8 D_d \times 10^3$; 如果 $D_d > 1000 \mu\text{m}$, $U(D_d) = 133.046 D_d^{0.5}$, 并且 $U(D_d)$ 的最大值为 9.17 m/s ; 而气溶胶末速度为 $U(d_p) = \rho_p d_{pg}^2 C_c / (18\mu_a)$, ρ_p 为气溶胶颗粒的密度; Sc 为气溶胶颗粒的 Schmidt 数, $Sc = \mu_a / (\rho_a D_{\text{diff}})$, ρ_w 和 μ_w 分别为雨滴密度和动力粘度; D_{diff} 为扩散系数, $D_{\text{diff}} = k_b T C_c / (3\pi \mu_a d_p)$; k_b 为 Boltzmann 常数; T 为介质绝对温度; C_c 为 Cunningham 滑移修正系数, $C_c = 1 + 2.493 \lambda / d_p + 0.84 \lambda / d_p \exp(-0.435 d_p / \lambda)$, 其中 λ 为大气中气体分子的平均自由程; St 为气溶胶颗粒的 Stokes 数, $St = 2\tau_p U(D_d) C_c / D_d$, τ_p 为气溶胶颗粒的弛豫时间尺度, $\tau_p = \rho_p d_p^2 / (18\mu_a)$; S^* 为一个无量纲参数, $S^* = [1.2 + (1/12) \ln(1 + Re)] / [1 + \ln(1 + Re)]$ 。当 $St \leq S^*$ 时, 认为碰撞效率 $E(d_p, D_d)$ 的惯性碰撞部分等于零。需要注意的是, $0 \leq E(d_p, D_d) \leq 1$ 。本文取 $\rho_a = 1.193 \text{ kg/m}^3$, $\rho_w = 997.45 \text{ kg/m}^3$, $\rho_p = 2270 \text{ kg/m}^3$, $T = 296.15 \text{ K}$, $\mu_a = 1.83245 \times 10^{-5} \text{ kg/(m}\cdot\text{s)}$, $\lambda = 6.73 \times 10^{-8} \text{ m}$ 。

本文认为气溶胶初始时刻的尺度分布、雨滴尺度分布均可以由对数正态函数所代表:

$$\begin{cases} n_p(d_p, t) = \frac{N_p}{\sqrt{2\pi \ln \sigma_{pg}}} \exp\left[-\frac{\ln^2(d_p/d_{pg})}{2 \ln^2 \sigma_{pg}}\right] \frac{1}{d_p}, \\ n_d(D_d) = \frac{N_d}{\sqrt{2\pi \ln \sigma_{dg}}} \exp\left[-\frac{\ln^2(D_d/D_{dg})}{2 \ln^2 \sigma_{dg}}\right] \frac{1}{D_d}, \end{cases} \quad (5)$$

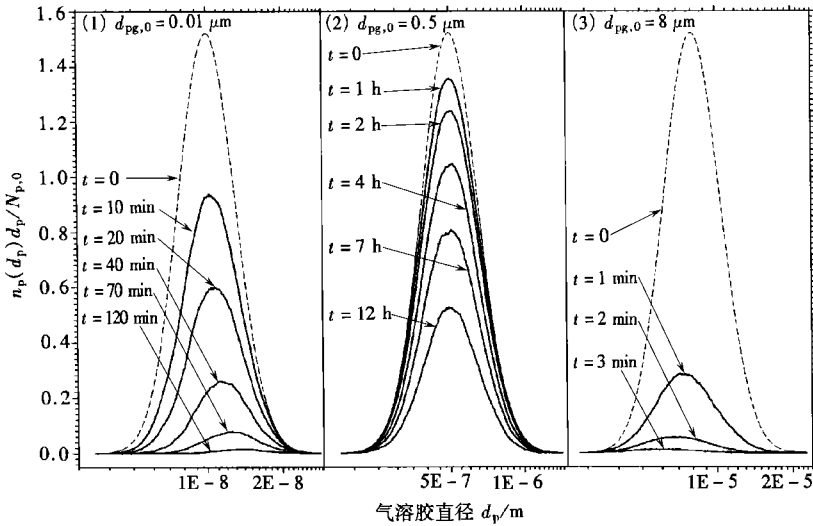
其中 N_p 和 N_d 、 d_{pg} 和 D_{dg} 、 σ_{pg} 和 σ_{dg} 分别为 t 时刻气溶胶和雨滴的数目浓度、几何平均尺度、几何标准偏差。

在降雨量 $w_1 (= 10 \text{ g/m}^3)$ 一定的情况, 为了考察对数正态分布的雨滴谱对气溶胶湿去除

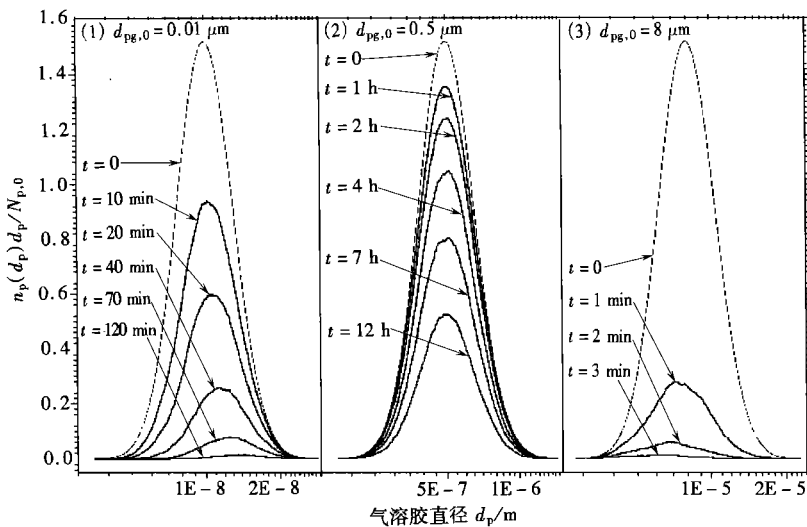
效果的影响, 通过变动雨滴几何平均尺度 D_{dg} (分别为 0.5 mm 和 0.2 mm) 和雨滴几何标准偏差 σ_{dg} (分别为 1.1 和 1.5), 利用 MMC 算法数值模拟了 ASD 的时间演变过程, 此时 ASD 满足对数正态分布, $N_{p,0}$ 为 $10^6 N m^{-3}$, $\sigma_{pg,0}$ 为 1.3, $d_{pg,0}$ 分别为 0.01 μm , 0.5 μm 和 8 μm . 对于对数正态分布的雨滴谱, 其雨滴总数目 N_d 依据降雨量计算如下:

$$N_d = w_1 \left[\frac{\pi}{6} \rho_w D_{dg}^3 \exp \left(\frac{9}{2} \sigma_{dg}^2 \right) \right]. \quad (6)$$

图 1 展示了不同的 RSD 时几个特定时刻处的 ASD 曲线, 而图 2 为气溶胶相对数目 ($N_p(t)/N_{p,0}$) 随时间的演变过程. 为了方便表述, 称具有 $D_{dg} = 0.5$ mm 且 $\sigma_{dg} = 1.5$ 的对数正态雨滴尺度分布的降雨过程为降雨 A, 称 $D_{dg} = 0.5$ mm 且 $\sigma_{dg} = 1.1$ 时的降雨过程为降雨 B, 称 $D_{dg} = 0.2$ mm 且 $\sigma_{dg} = 1.5$ 的降雨过程为降雨 C, 称 $D_{dg} = 0.2$ mm 且 $\sigma_{dg} = 1.1$ 的降雨过程为降雨 D; 另外, 称 $d_{pg,0} = 0.01$ μm 的气溶胶群为小尺度气溶胶, 称 $d_{pg,0} = 0.5$ μm 的气溶



(a) 降雨 A, $D_{dg} = 0.5$ mm, $\sigma_{dg} = 1.5$



(b) 降雨 B, $D_{dg} = 0.5$ mm, $\sigma_{dg} = 1.1$

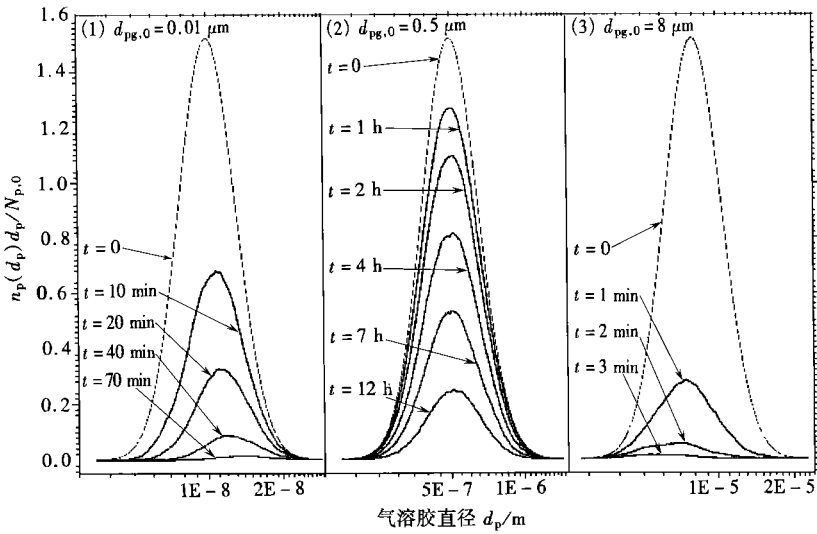
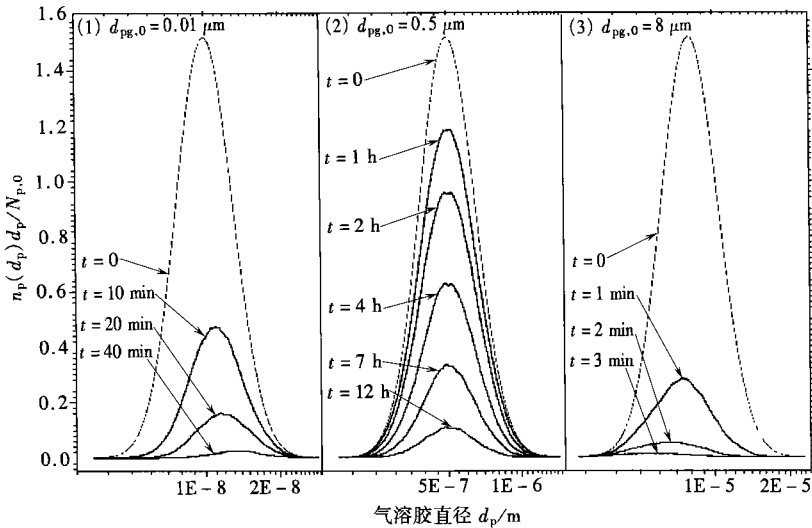
(c) 降雨 C, $D_{dg} = 0.2 \text{ mm}$, $\sigma_{dg} = 1.5$ (d) 降雨 D, $D_{dg} = 0.2 \text{ mm}$, $\sigma_{dg} = 1.1$

图 1 不同的雨滴尺度分布下气溶胶尺度分布的时间演变过程

胶群为中等尺度气溶胶, $d_{pg,0} = 8 \mu\text{m}$ 的气溶胶群为大尺度气溶胶。

首先考察 σ_{dg} 相同而 D_{dg} 不同时气溶胶的湿去除情况。当 $\sigma_{dg} = 1.5$ 时(对应于降雨 A 和降雨 C), 对于小尺度气溶胶, 比较图 1(a)_(1) 和图 1(c)_(1) 中特定时刻的 ASD 曲线, 可以发现, 降雨 C 时 $t = 70 \text{ min}$ 时的 ASD 曲线类似于降雨 A 时 $t = 120 \text{ min}$ 时的 ASD 曲线, 也就是说, 70 min 的降雨 C 就可以达到 120 min 的降雨 A 相似的小尺度气溶胶湿去除效果。图 2(1) 中降雨 C 时 $N_p(t)/N_{p,0}$ 比降雨 A 时下降得更快, 同样表明同一段时间内降雨 C 比降雨 A 清除了更多的小尺度气溶胶; 对于大尺度气溶胶, 降雨 A 和 C 均在几分钟内就清除了几乎所有的气溶胶, 图 1(a)_(3) 和图 1(c)_(3) 中相同时刻处的 ASD 曲线几乎相同, 表明此时降雨 A 和 C 具有几乎相同的大尺度气溶胶湿去除效果。但是通过考察图 2(3), 可以发现, 相比较于降雨 C, 降雨 A 时 $N_p(t)/N_{p,0}$ 下降得稍快一些, 表明降雨 A 对大尺度气溶胶的湿去除效果稍稍优于降雨

C. 对于中等尺度气溶胶, 所有降雨过程对其的湿去除效果均不理想, 需要非常长的降雨过程 (12 h) 才能达到很短的降雨过程 (20 min) 对小尺度气溶胶或更短的降雨过程 (少于 1 min) 对大尺度气溶胶的相似的湿去除效果. 比较图 1(a)₍₂₎ 和图 1(c)₍₂₎ 中同样时刻处的 ASD 曲线以及图 2₍₂₎ 中 $N_p(t)/N_{p,0}$ 随时间演变的曲线, 可发现降雨 C 具有比降雨 A 更好的中等尺度气溶胶湿去除效果. 考察 σ_{dg} 均为 1.1 而 D_{dg} 不同的降雨过程 (降雨 B 和降雨 D) 对不同尺度气溶胶的湿去除情况, 发现, 相比较于降雨 D ($D_{dg} = 0.2$ mm), 降雨 B ($D_{dg} = 0.5$ mm) 稍稍有利于大尺度气溶胶的湿沉降而明显不利于小尺度和中等尺度气溶胶的湿沉降. 综合以上分析, 有如下结论: 在相同的降雨量的情况下, 雨滴几何平均尺度越小, 越有利于小尺度和中等尺度气溶胶的湿沉降, 而稍稍不利于大尺度气溶胶的湿沉降; 另外, 任何降雨过程对大尺度气溶胶的清除效果都依次好于小尺度气溶胶和中等尺度气溶胶.

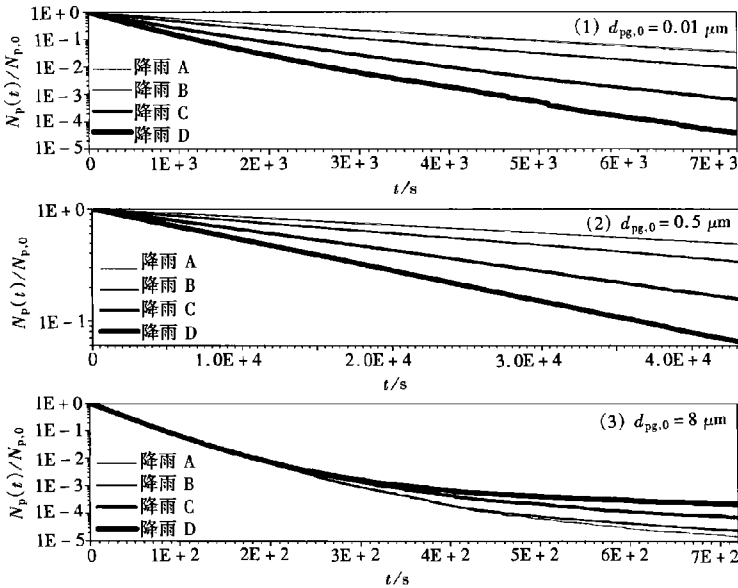


图 2 不同降雨过程中气溶胶相对数目的时间演变过程

运用类似的方法论, 可以考察 D_{dg} 相同而 σ_{dg} 不同时气溶胶的湿去除情况, 可以发现如下结论: 在相同的降雨量的情况下, 雨滴几何标准偏差越小, 越能有效地湿去除小尺度和中等尺度气溶胶, 但是稍稍不利于大尺度气溶胶的湿沉降.

以上结论可以通过分析气溶胶的清除系数来解释. 实际上, 气溶胶的清除系数反映了其被雨滴所清除的速率, 所以得到不同降雨过程中气溶胶尺度与清除系数的关系也可从侧面研究不同降雨过程对不同尺度气溶胶的湿去除效果. 图 3 为 4 种降雨过程中气溶胶尺度与清除系数的关系. 对于小尺度气溶胶而言, 主要由于 Brown 扩散机制所主导而被雨滴所清除. 对于同样总质量的雨滴群, 其 D_{dg} 越小, σ_{dg} 越小, 如公式 (6) 所示, N_d 将越来越多, 雨滴总表面积也将越来越大, 故它们捕集小尺度气溶胶的几率也越大. 中等尺度气溶胶主要受 Brown 扩散和拦截机制的共同作用而被雨滴所清除, 拦截机制所主导的碰撞效率 (称为 E_2) 取决于气溶胶尺度与雨滴尺度的比值 (d_p/D_d), D_{dg} 越小, σ_{dg} 越小 (即雨滴尺度越来越统一), 则比值 d_p/D_d 越大, 使得 E_2 越大; 另外, 根据上面的分析, D_{dg} 和 σ_{dg} 越小, Brown 扩散机制所主导的碰撞效率 (称为 E_1) 也将越大; 所以, 综合起来, D_{dg} 和 σ_{dg} 越小, 越有利于中等尺度气溶胶在 Brown 扩散和拦截机制的共同控制下被雨滴所清除. 对于大尺度气溶胶而言, 主要受惯性碰撞机制所主导而被清除, Brown 扩散和拦截机制对其清除过程的影响力仍然存在但是相对较弱. 惯性碰

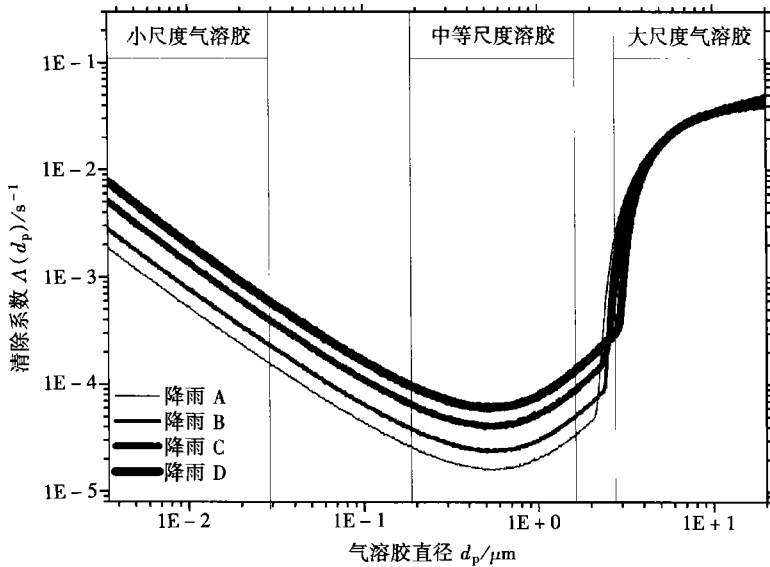


图3 不同降雨过程中气溶胶尺度与清除系数的关系

撞机制所主导的碰撞效率(E_3) 近似^[7] 等于 $(1 - 0.9St^{-0.5})$, 即与气溶胶颗粒的 Stokes 数(St) 呈正相关关系。由于雨滴末速度采用三段式公式计算, E_3 与 D_d 可能正相关或负相关。当 $D_d < 100 \mu\text{m}$ 时, St 与 D_d 呈正相关关系, 从而 E_3 与 D_d 呈正相关关系, 所以此时较大的 D_{dg} 和 σ_{dg} 将导致较大的 E_3 ; 而当 $D_d > 1000 \mu\text{m}$ 时, St 与 D_d 呈负相关关系, 从而 E_3 与 D_d 也呈负相关关系, 此时较大的 D_{dg} 和 σ_{dg} 反而导致较小的碰撞效率。而气溶胶的清除系数不仅仅取决于碰撞效率, 还与雨滴尺度分布等紧密相关(参见公式(3)), 几种因素共同作用的结果是, 那些尺度较小的大尺度气溶胶($2 \mu\text{m} < d_p < 10 \mu\text{m}$) 的清除系数随着 D_{dg} 和 σ_{dg} 的增大而增大, 如图3所示, 这表明较大的 D_{dg} 和 σ_{dg} 有利于这些尺度较小的大尺度气溶胶的湿去除; 而图3中那些尺度较大的大尺度气溶胶($d_p > 10 \mu\text{m}$) 的清除系数随着 D_{dg} 和 σ_{dg} 的增大反而减小, 这表明, 较小的 D_{dg} 和 σ_{dg} 反而有利于它们的湿去除。应该注意到, 对于大尺度气溶胶, 其尺度越大, 任何降雨过程中清除系数均越大。也应该注意到, 大尺度气溶胶的清除系数依次比小尺度气溶胶和中等尺度气溶胶的清除系数大, 而中等尺度气溶胶的清除系数最小, 它们很难被雨滴所捕集, 通常称为“Greenfield gap”^[22]。

以上结论可应用于人工喷淋等工业过程。例如, 工业上广泛应用的湿式喷淋除尘器对 PM2.5 (空气动力学直径小于 $2.5 \mu\text{m}$ 的细微颗粒) 的除尘效率非常低, 在不增加用水量的前提下, 通过设计合理的喷嘴使得水雾粒径较小和较为均匀, 即使得水滴几何平均尺度和几何标准偏差减小, 可以预计, 在仍然保持对较大尺度粉尘的高捕集效率的同时, 将提高湿式除尘器对 PM2.5 的除尘效率。

MMC 的数值模拟结果与 Jung 等^[7] 的矩方法结果定性符合, 但是不能达到定量的符合, 作者认为矩方法的结果存在一定的局限性, 基于如下原因: (a) 为了能够应用矩方法, Jung 等^[7] 把碰撞效率简化成气溶胶尺度 d_p 的指数的函数, 所采用的简化方法包括把 Cunningham 滑移修正系数简化为 $C_c = 1 + 3.34M/d_p$, 把碰撞效率的惯性碰撞部分简化为 $(1 - 0.9St^{-0.5})$ 等; (b) Slimm 理论公式^[20] 中碰撞效率的惯性碰撞部分只对于较大 Stokes 数的气溶胶起作用 ($St > S^*$), 矩方法无法考虑这种选择性, 这将会导致很大的数值误差; (c) 矩方法认为气溶胶尺度分布函数在演变过程中始终保持对数正态分布, 即认为其具有严格的“自保持”特性, 但是对于

尺度范围在 2~ 5 μm 的气溶胶群,如图 3 所示,清除系数随气溶胶尺度增加而急剧上升,MMC 的数值模拟结果表明,此时气溶胶尺度分布曲线在时间演变过程中并不严格保持对数正态曲线,也就是说此时“自保持”特性并不严格遵守。所以本文认为矩方法可以用于描述一些特定尺度范围、特定湿沉降机制的气溶胶湿沉降过程,但是并不适合于实际工况中的气溶胶湿沉降的描述。相反,MMC 算法不需要进行任何公式方面的假设,对实际的雨滴尺度分布和气溶胶尺度分布也无任何限制,只要能够给出关键的清除系数模型,就能够描述任何工况中的气溶胶湿沉降过程。

3 总 结

本文简单介绍了考虑气溶胶湿沉降的多重 Monte Carlo 算法,该算法以基于时间驱动 MC 方法为框架,引入加权的虚拟气溶胶和虚拟雨滴,能够在演变过程中同时保持计算区域体积不变和计算区域内模拟颗粒总数目不变,并且可以避免对雨滴尺度分布的积分计算。

本文利用多重 Monte Carlo 算法考察了不同对数正态分布的雨滴谱对气溶胶湿沉降效果的影响,结果表明雨滴几何平均尺度越小,雨滴几何标准偏差越小,越有利于小尺度和中等尺度气溶胶的湿去除,而稍稍不利于大尺度气溶胶的湿去除。另外, Jung 等^[7]发展的描述气溶胶湿沉降的矩方法只适合于特定工况的计算,而多重 Monte Carlo 算法理论上可以用于描述任何实际工况。

[参 考 文 献]

- [1] Mircea M, Stefan S. A theoretical study of the microphysical parameterization of the scavenging coefficient as a function of precipitation type and rate[J]. *Atmospheric Environment*, 1998, **32**(17): 2931—2938.
- [2] Mircea M, Stefan S, Fuzzi S. Precipitation scavenging coefficient: influence of measured aerosol and raindrop size distributions[J]. *Atmospheric Environment*, 2000, **34**(30): 5169—5174.
- [3] Chate D M, Pranesha T S. Field studies of scavenging of aerosols by rain events[J]. *Journal of Aerosol Science*, 2004, **35**(6): 695—706.
- [4] Loosmore G A, Cederwall R T. Precipitation scavenging of atmospheric aerosols for emergency response applications: testing an updated model with new real-time data[J]. *Atmospheric Environment*, 2004, **38**(7): 993—1003.
- [5] Zhang L M, Michelangeli D V, Taylor P A. Numerical studies of aerosol scavenging by low-level, warm stratiform clouds and precipitation[J]. *Atmospheric Environment*, 2004, **38**(28): 4653—4665.
- [6] Jung C H, Kim Y P, Lee K W. Analytic solution for polydispersed aerosol dynamics by a wet removal process[J]. *Journal of Aerosol Science*, 2002, **33**(5): 753—767.
- [7] Jung C H, Kim Y P, Lee K W. A moment model for simulating raindrop scavenging of aerosols[J]. *Journal of Aerosol Science*, 2003, **34**(9): 1217—1233.
- [8] Friedlander S K. *Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Behavior* [M]. New York: Wiley, 1997.
- [9] Liffman K. A direct simulation Monte Carlo method for cluster coagulation[J]. *Journal of Computational Physics*, 1992, **100**(1): 116—127.
- [10] Garcia A L, Van den Broek C, Aertsens M, et al. A Monte Carlo simulation of coagulation[J]. *Physica A*, 1987, **143**(3): 535—546.
- [11] Maisels A, Kruijs 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.
- [12] 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.
- [13] ZHAO Hai_bo, ZHENG Chu_guang, XU Ming_hou. Multi_Monte Carlo method for coagulation and condensation/evaporation in dispersed systems[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2005, **286**(1): 195—208.
- [14] ZHAO Hai_bo, ZHENG Chu_guang, XU Ming_hou. Multi_Monte Carlo approach for general dynamic equation considering simultaneous particle coagulation and breakage [J]. Powder Technology, 2005, **154**(2/3): 164—178.
- [15] ZHAO Hai_bo, ZHENG Chu_guang. Monte Carlo solution of wet removal of aerosols by precipitation [J]. Atmospheric Environment, 2006, **40**(8): 1510—1525.
- [16] 赵海波, 郑楚光, 徐明厚. 求解考虑颗粒凝并的通用动力学方程的多重 Monte Carlo 算法[J]. 应用数学和力学, 2005, **26**(7): 875—882.
- [17] 赵海波, 郑楚光, 徐明厚. 凝并和成核机理下颗粒尺度分布的 Monte Carlo 求解[J]. 高等学校化学学报, 2005, **26**(11): 2086—2089.
- [18] 赵海波, 郑楚光. 同时发生的颗粒凝并和沉积现象的 Monte Carlo 模拟[J]. 中国科学, E 辑: 技术科学, 2006, **36**(3): 270—284.
- [19] 赵海波, 郑楚光, 陈胤密. 考虑颗粒碰撞的多重 Monte Carlo 算法[J]. 力学学报, 2005, **37**(5): 564—572.
- [20] Slim W G N. Precipitation scavenging[A]. In: Raderson D, Ed. Atmospheric Sciences and Power Production, Division of Biomedical Environmental Research [C]. Washington D C: US Department of Energy, 1983, 466—532.
- [21] 盛裴轩, 毛节太, 李建国, 等. 大气物理学[M]. 北京: 北京大学出版社, 2003, 332—333.
- [22] Greenfield S. Rain scavenging of radioactive particulate matter from the atmosphere[J]. Journal of Meteorology, 1957, **14**(2): 115—125.

Stochastic Algorithm and Numerical Simulation for Drop Scavenging of Aerosols

ZHAO Hai_bo, ZHENG Chu_guang

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

Abstract: The time evolution of aerosol size distribution during precipitation, which is founded mathematically by general dynamic equation (GDE) for wet removal, describes quantitatively the process of aerosol wet scavenging. The equation depends on aerosol size distribution, raindrop size distribution and the complicated model of scavenging coefficient that takes account of the important wet removal mechanisms such as Brownian diffusion, interception and inertial impaction. Normal numerical methods can hardly solve GDE, which is a typical partially integro-differential equation. A new multi-Monte Carlo method was introduced to solve GDE for wet removal, and then was used to simulate the wet scavenging of aerosols in the real atmospheric environment. The results of numerical simulation show that, the smaller the lognormal raindrop size distribution and lognormal initial aerosol size distribution, the smaller geometric mean diameter or geometric standard deviation of raindrops can help scavenge small aerosols and intermediate size aerosols better, though large aerosols are prevented from being collected in some ways.

Key words: wet removal; aerosol; precipitation; Monte Carlo method; numerical simulation