

特征参数对 DSMC 方法模拟声场中 颗粒碰撞的影响

郭孝武^{1,2}, 凡凤仙^{1,2}, 胡晓红^{1,2}, 苏明旭^{1,2}

(1. 上海理工大学 能源与动力工程学院, 上海 200093;

2. 上海理工大学 上海市动力工程多相流动与传热重点实验室, 上海 200093)

摘要: 直接从颗粒受力和运动出发, 基于直接模拟蒙特卡洛(DSMC)方法建立颗粒碰撞模型, 模拟声场中颗粒的碰撞过程, 通过改变模拟条件, 探讨 DSMC 方法中的特征参数(取样颗粒的数目权重、网格数目、时间步长)对颗粒碰撞率和计算时间的影响。结果表明: 频率越大, 颗粒容积份额变化越迅速, 颗粒空间分布越不均匀; 数目权重的增加对颗粒碰撞率影响较小, 而对计算时间的影响显著, 使其迅速减少; 网格数目增加, 碰撞率降低, 计算时间则先迅速降低, 随后在低频时基本不变, 高频时略有上升。研究还发现: 随着碰撞时间步长的增加, 低频声场中碰撞率单调增加, 高频声场中碰撞率先增加而后出现波动; 碰撞时间步长的增加将引起计算时间减少, 减少量在碰撞步长较小时最为明显。

关键词: 声场; 颗粒; 碰撞; 直接模拟蒙特卡洛方法; 特征参数

中图分类号: X 513

文献标志码: A

Influence of Characteristic Parameters in the Simulation of Acoustic Particle Collision Using DSMC Method

GUO Xiaowu^{1,2}, FAN Fengxian^{1,2}, HU Xiaohong^{1,2}, SU Mingxu^{1,2}

(1. School of Energy and Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China; 2. Shanghai Key Laboratory of Multiphase Flow and Heat Transfer in Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China)

Abstract: An inter-particle collision model was established based on the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method as well as the force analysis and the motion equation. The collision process of the particles in acoustic field was examined. Through changing the numerical simulation conditions, the influences of the characteristic parameters, such as the weight value of the number of sampling particles, the cell number and the time-step size used in DSMC method, on the particle collision rate and computational time were discussed. The results show that the higher the acoustic frequency is, the more rapidly the particle volume fraction changes and the more unevenly the particles are distributed in space. The increase of the weight value of the number has a small effect on the collision rate, but it significantly reduces the computational time. As the cell number increases, the

收稿日期: 2016-01-25

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51206113, 51176128, 51576130); 上海市科委科研计划资助项目(13DZ2260900)

第一作者: 郭孝武(1988-), 男, 硕士研究生. 研究方向: 气固两相流数值模拟. E-mail: ross_2015@163.com

通信作者: 凡凤仙(1982-), 女, 副教授. 研究方向: 燃烧源污染物排放控制、气固流动与传递.

E-mail: fanfengxian@hotmail.com

collision rate decreases, whereas the computational time decreases rapidly at first and then almost keeps constant at lower acoustic frequency and increases slightly at higher acoustic frequency. It is also found that as the time-step size for determining the inter-particle collision increases, the collision rate increases monotonously at lower frequency, while it increases at first and then fluctuates at higher frequency. The increase of the time-step size results in the decrease of the computational time and the decrease is more obvious with a smaller time-step size.

Keywords: *acoustic field; particle; collision; direct simulation Monte Carlo method; characteristic parameter*

可吸入颗粒物(空气动力学直径小于或等于 $10\text{ }\mu\text{m}$ 的颗粒物, 又称 PM_{10}), 特别是其中的细颗粒物(空气动力学直径小于或等于 $2.5\text{ }\mu\text{m}$ 的颗粒物, 又称 $\text{PM}_{2.5}$) 是我国城市大气的首要污染物, 严重危害着大气环境和国民健康^[1-2]. 这类颗粒物主要来源于燃煤电站、交通运输和工业过程^[3-4]. 由于这些颗粒粒径小、质量轻、数目多, 现有的常规除尘装置对其难以奏效^[5]. 为控制 PM_{10} , $\text{PM}_{2.5}$ 的排放, 一些学者提出了凝并预处理技术, 即利用外加条件(声场、电场、磁场、过饱和蒸汽场)作用促进微粒凝并长大, 以提高除尘装置的效率. 与其他凝并预处理技术相比, 声凝并不受颗粒荷电性、磁性、润湿性, 以及烟气含湿量等的限制, 因而富有应用潜力^[6-7]. 然而, 由于测量仪器和声源条件的局限性, 单纯依靠实验研究难以获得声凝并过程的细节信息, 也难以实现声凝并效果的优化, 且实验费用也往往很昂贵. 随着计算机数值模拟技术的飞速发展, 建立切合实际的声凝并模型, 寻求有效的数值计算方法, 从而开展声凝并过程和效果优化的数值模拟研究已成为声凝并研究的关键.

目前, 用于声凝并的数值模拟方法可归纳为区域算法、矩量法和直接模拟蒙特卡罗(direct simulation Monte Carlo, DSMC)方法^[8]. 其中, DSMC方法立足于气体分子运动论, 将所计算的颗粒场用取样颗粒场进行置换, 对每一个取样颗粒赋予一个数目权重(即取样颗粒所代表的真实颗粒数目), 跟踪取样颗粒的运动轨迹, 通过概率的方法判断碰撞是否发生, 并对碰撞后的颗粒凝并事件进行处理, 该方法可以方便地分析多分散颗粒凝并的动态过程以及粒径演变规律^[9-12]. 2006年, Sheng等^[9]利用常体积 Monte Carlo 方法在初始颗粒及团聚体均为球形的前提下, 研究了行波声场中液态 $\text{PM}_{2.5}$ 的声凝并, 发现数值模拟结果在一些情况下与实验吻合较好, 而当颗粒初始粒径分布发生改变时,

则与实验存在明显差异; 2007年, 他们引入分形维数描述颗粒团聚体的形状和结构, 将上述声凝并模型推广到固体颗粒的声凝并中^[10]. 与 Sheng等^[9-10]在颗粒通用动力学方程和凝并核函数的基础上建立声凝并模型不同, 凡凤仙等^[11-13]从颗粒运动方程出发, 利用 DSMC 方法研究 $\text{PM}_{2.5}$ 在行波声场中的碰撞特性^[11]、在驻波声场中的碰撞和凝并规律^[12-13]. 颗粒碰撞是其发生凝并的基础和前提, 然而, 在利用 DSMC 方法处理颗粒碰撞时, 3个特征参数(时间步长、取样颗粒的数目权重、计算区域内的网格数目)需要人为设定, 这些特征参数的取值将影响到计算精度^[14-16]. 时间步长与取样颗粒的数目权重越小, 计算越精确, 然而随之出现的是计算代价的增加; 若在一个网格范围内判断颗粒碰撞的发生, 则计算区域内的网格数目也将对计算结果和计算代价带来影响. 因此, 本文基于 DSMC 方法, 在不同特征参数条件下对声场中颗粒的碰撞过程进行数值模拟, 确定特征参数对颗粒碰撞率和计算时间的影响, 为利用 DSMC 方法准确、高效地研究 PM_{10} , $\text{PM}_{2.5}$ 的声凝并提供参考.

1 声场中颗粒动力学模型

为利用 DSMC 方法研究声场中颗粒的碰撞过程, 作出如下简化假设:

- a. 声场为一维平面驻波声场, 声波波动方向为水平方向;
- b. 由于烟气的物性参数和空气类似, 且其压力不太高, 将气体介质视为理想空气;
- c. 颗粒为刚性球体, 忽略颗粒的转动;
- d. 由于声辐射压力的作用效果极其微弱^[17], 不考虑声辐射压力;
- e. 颗粒碰撞在各网格内进行, 且为二元碰撞, 为着重考虑颗粒的碰撞, 暂不考虑其凝并, 认为颗粒

碰撞后弹开;

f. 在颗粒碰撞过程中,颗粒发生滑移时所受摩擦力遵守库仑摩擦定律.

1.1 声波波动方程

由 Navier-Stokes 方程,可推导出无旋、无粘流体中 x 向驻波声场的波动方程为

$$u_{fx}(x, t) = u_a \sin(kx) \cos(\omega t) \quad (1)$$

式中: u_{fx} 为声波引起的流体介质振动速度; x 为位置坐标; t 为时间; u_a 为速度振幅; k 为波数, $k = \omega/c$, c 为声速; $\omega = 2\pi f$, f 为声场频率.

当流体中存在颗粒时,流体会在颗粒表面产生扰流.若考虑颗粒周围流体的旋度和粘度,将给流场求解带来很大困难.本文研究的是声波对悬浮于气体中的微粒的作用,如果用 d_p 表示颗粒直径, λ 表示声波波长, u_{px} 表示颗粒速度的 x 向分量, ρ_f 表示流体密度, μ_f 表示流体动力粘度,则满足: $d_p \ll \lambda$; $u_{px} \ll c$; 雷诺数 $Re_p = |u_{fx} - u_{px}| \rho_f d_p / \mu_f \ll 1$; 流体密度变化的时间尺度远大于粘性扩散的时间尺度,即 $d_p^2 c \rho_f / (\mu_f \lambda) \ll 1$. 在此条件下,可将流体视为无旋、无粘流体,颗粒附近的流场可由式(1)描述^[18].

习惯上常用声压级和频率描述声场,声压级与速度振幅 u_a 的关系为

$$L = 20 \lg \left(\frac{u_a c \rho_f}{\sqrt{2} P_r} \right) \quad (2)$$

式中: L 为声压级, dB; P_r 为参考声压, $P_r = 2 \times 10^{-5}$ Pa.

1.2 颗粒运动方程

设重力方向为 z 向,与 x 和 z 垂直的方向为 y 向,流体携带颗粒沿 y 向以一定速度通过声场空间.根据牛顿第二定律,颗粒运动方程可写为

$$\begin{aligned} m_p \frac{du_{px}}{dt} &= 3\pi\mu_f d_p (u_{fx} - u_{px}) / C_c + \\ &m_f \left(\frac{\partial u_{fx}}{\partial t} + u_{fx} \frac{\partial u_{fx}}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} m_f \cdot \\ &\left(\frac{\partial u_{fx}}{\partial t} + u_{fx} \frac{\partial u_{fx}}{\partial x} - \frac{du_{px}}{dt} \right) + \frac{3}{2} d_p^2 \cdot \\ &\sqrt{\pi \rho_f \mu_f} \int_0^t \frac{\left(\frac{du_{fx}}{dt'} - \frac{du_{px}}{dt'} \right)}{\sqrt{t - t'}} dt' \end{aligned} \quad (3a)$$

$$m_p \frac{du_{py}}{dt} = 3\pi\mu_f d_p (u_{fy} - u_{py}) / C_c \quad (3b)$$

$$\begin{aligned} m_p \frac{du_{pz}}{dt} &= 3\pi\mu_f d_p (u_{fz} - u_{pz}) / C_c + \\ &m_p g - m_f g \end{aligned} \quad (3c)$$

其中:式(3a)等号右边4项依次为 Stokes 力的 x 向

分量、压力梯度力、虚拟质量力、Basset 力;式(3b)等号右边为 Stokes 力的 y 向分量;式(3c)等号右边3项分别为 Stokes 力的 z 向分量、重力、浮力.式中: m_p 为颗粒质量; m_f 为与颗粒等体积的流体质量; u_{fy} 和 u_{fz} 分别为流体速度的 y, z 向分量; u_{py} 与 u_{pz} 分别为颗粒速度的 y, z 向分量; ρ_p 为颗粒密度; g 为重力加速度; t' 为时间变量; C_c 为 Cunningham 修正系数,其表达式为^[13]

$$C_c = 1 + Kn [1.257 + 0.400 \exp(-1.10 / Kn)] \quad (4)$$

式中, Kn 为 Knudsen 数, $Kn = 2l_m / d_p$, l_m 为气体分子平均自由程, m.

1.3 描述颗粒碰撞的 DSMC 方法

对含有大量 PM₁₀, PM_{2.5} 的气固悬浮体系施加驻波声场,颗粒间的碰撞不可避免.为了准确地描述声场中颗粒的行为规律,理想的方法是跟踪到每一个颗粒,通过颗粒运动轨道来判断颗粒碰撞,但当颗粒量很大时,这种方法的计算量将是非常惊人的.由于颗粒数目庞大,利用颗粒轨道判断碰撞的方法难以胜任.解决这一问题的一个行之有效的途径是采用 DSMC 方法.由于 DSMC 方法处理的是远低于真实颗粒数目的取样颗粒,从而大大降低了计算量,特别适于在较大规模颗粒量和较大区域范围内对小粒径颗粒、较稀的气固两相流动进行模拟研究.在 DSMC 方法的前提下,不同研究者的处理和计算方法不尽相同,较常用的是将计算区域划分成若干个网格,在同一网格内判断颗粒之间是否发生碰撞,本文也采用该方法.

在 $\Delta \bar{t}$ 时间内,取样颗粒 i 和同一网格内的取样颗粒 j 所代表的真实颗粒的碰撞概率 P_{ij} 可写为^[11-13]

$$P_{ij} = \frac{w_j}{V_{ci}} \pi \left(\frac{d_{pi} + d_{pj}}{2} \right)^2 |\mathbf{u}_{p_{ij}}| \Delta \bar{t} \quad (5)$$

式中: w_j 为颗粒 j 的数目权重; V_{ci} 为颗粒 i 所在网格的体积; d_{pi} 和 d_{pj} 分别为颗粒 i 和颗粒 j 的直径; $\mathbf{u}_{p_{ij}}$ 为颗粒 i 和 j 的相对速度; $\Delta \bar{t}$ 为求解颗粒碰撞的时间步长.

取样颗粒 i 与同一网格中其他颗粒的总碰撞概率 P_i 可表示为

$$\begin{aligned} P_i &= \sum_{j=1}^N P_{ij} = \\ &\sum_{j=1}^N \frac{w_j}{V_{ci}} \pi \left(\frac{d_{pi} + d_{pj}}{2} \right)^2 |\mathbf{u}_{p_{ij}}| \Delta \bar{t} \end{aligned} \quad (6)$$

式中, N 为取样颗粒 i 所在网格的取样颗粒总数.

采用修正的 Nanbu 方法^[19]判断颗粒碰撞的发生,即对于任意取样颗粒 i ,在满足 $P_i < 1$ 的前提下,利用 $[0,1)$ 区间上均匀分布的随机数 R ,选择同一网格内的候选被碰取样颗粒 j 为

$$j = \text{int}[RN] + 1 \quad (7)$$

式中, $\text{int}[RN]$ 表示 RN 的整数部分. 如果 R 满足

$$R > \frac{j}{N} - P_{ij} \quad (8)$$

则认为取样颗粒 i 与 j 发生碰撞. 此时,保持颗粒位置不变,颗粒碰撞后速度根据动量定理计算^[19],即

$$\begin{aligned} \text{当 } \frac{m \mathbf{u}_{p_{ij}}^0}{|\mathbf{u}_{p_{ij,t}}^0|} \leq \frac{2}{7f_p(1+e)} \text{ 时,} \\ \mathbf{u}_{pi} = \mathbf{u}_{pi}^0 - (\mathbf{n} - f_p \boldsymbol{\tau})(m \mathbf{u}_{p_{ij}}^0) \cdot \\ (1+e) \frac{m_{pj}}{m_{pi} + m_{pj}} \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{pj} = \mathbf{u}_{pj}^0 + (\mathbf{n} - f_p \boldsymbol{\tau})(m \mathbf{u}_{p_{ij}}^0) \cdot \\ (1+e) \frac{m_{pi}}{m_{pi} + m_{pj}} \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \text{当 } \frac{m \mathbf{u}_{p_{ij}}^0}{|\mathbf{u}_{p_{ij,t}}^0|} > \frac{2}{7f_p(1+e)} \text{ 时,} \\ \mathbf{u}_{pi} = \mathbf{u}_{pi}^0 - \left[(1+e)(m \mathbf{u}_{p_{ij}}^0) \mathbf{n} + \right. \\ \left. \frac{2}{7} |\mathbf{u}_{p_{ij,t}}^0| \boldsymbol{\tau} \right] \frac{m_{pj}}{m_{pi} + m_{pj}} \\ \mathbf{u}_{pj} = \mathbf{u}_{pj}^0 + \left[(1+e)(m \mathbf{u}_{p_{ij}}^0) \mathbf{n} + \right. \end{aligned} \quad (11)$$

表 1 数值计算参数

Tab.1 Computational parameters

参数	T/K	p/kPa	$d_p/\mu\text{m}$	$\rho_p/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	$n_p/(\text{个} \cdot \text{cm}^{-3})$	f_p	e	L/dB	$\Delta t/\text{s}$
数值	300	101.325	2.5	2 000	2×10^8	0.2	0.8	155	5×10^{-6}

2.2 颗粒运动方程的求解

采用定步长四阶 Runge-Kutta 算法对式(3)进行求解. 其中, Basset 力与颗粒经历的运动过程有关. 将流体速度和颗粒速度基于经历的时间步离散, 可实现 Basset 力的数值求解. 例如, 在时间区间 $0 \sim t_3$ 离散为 $0 \sim t_1, t_1 \sim t_2, t_2 \sim t_3$ 的情况下, 如果这 3 个时间区间对应的流体与颗粒速度增量分别为 $\Delta u_{fx0}, \Delta u_{fx1}, \Delta u_{fx2}$ 与 $\Delta u_{px0}, \Delta u_{px1}, \Delta u_{px2}$, 则 t_3 时刻颗粒受到的 Basset 力 F_B 可按式求解^[20]:

$$\begin{aligned} F_B = \frac{3}{2} d_p^2 \sqrt{\pi \rho_f \mu_f} \left[\frac{\Delta u_{fx0} - \Delta u_{px0}}{\sqrt{t_3}} + \right. \\ \left. \frac{\Delta u_{fx1} - \Delta u_{px1}}{\sqrt{t_3 - t_1}} + \frac{\Delta u_{fx2} - \Delta u_{px2}}{\sqrt{t_3 - t_2}} \right] \end{aligned} \quad (16)$$

颗粒运动轨迹可由各时间步长内颗粒的位移叠

$$\frac{2}{7} |\mathbf{u}_{p_{ij,t}}^0| \boldsymbol{\tau} \left] \frac{m_{pi}}{m_{pi} + m_{pj}} \quad (12)$$

式中: $\mathbf{n}$ 为颗粒 i 指向颗粒 j 的法向单位向量; f_p 为摩擦系数; e 为恢复系数; $\mathbf{u}_{p_{ij}}^0$ 为碰前颗粒 i 相对 j 的速度; $\mathbf{u}_{p_{ij,t}}^0$ 为 $\mathbf{u}_{p_{ij}}^0$ 的切向分量; $\boldsymbol{\tau}$ 为单位切向量. $\mathbf{u}_{p_{ij}}^0, \mathbf{u}_{p_{ij,t}}^0, \boldsymbol{\tau}$ 分别由以下各式计算为

$$\mathbf{u}_{p_{ij}}^0 = \mathbf{u}_{pi}^0 - \mathbf{u}_{pj}^0 \quad (13)$$

$$\mathbf{u}_{p_{ij,t}}^0 = \mathbf{u}_{p_{ij}}^0 - (\mathbf{u}_{p_{ij}}^0 \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \quad (14)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\mathbf{u}_{p_{ij,t}}^0}{|\mathbf{u}_{p_{ij,t}}^0|} \quad (15)$$

2 数值计算方法

2.1 边界条件与计算参数

取 $\lambda_{2k} \times 1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$ 的三维空间为计算区域, 其中 λ_{2k} 表示频率 $f = 2 \text{ kHz}$ 时对应的声波波长, 沿 x 向将计算区域划分为若干个大小相等的网格. 由声波的周期性和本文采用的声波频率 ($f = 2, 4, 6 \text{ kHz}$) 可知, 对 x, y, z 这 3 个方向的边界均可采用周期性边界条件^[13]进行处理, 对各个取样颗粒采用相同的数目权重, 主要计算参数见表 1. 其中: T 为气体温度; p 为气体静态压力; n_p 为颗粒数目浓度; Δt 为求解颗粒运动的时间步长. 本文通过试算确定 Δt , 表 1 中给出的 Δt 满足 3 种计算频率下颗粒运动的计算精度要求.

加得到, 根据二阶隐式 Adams 插值算法, 颗粒的位移 $\mathbf{S}_p$ 可表示为

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_p(t + \Delta t) = \mathbf{S}_p(t) + \\ \frac{\Delta t}{2} [\mathbf{u}_p(t + \Delta t) + \mathbf{u}_p(t)] \end{aligned} \quad (17)$$

式中, $\mathbf{u}_p$ 为颗粒速度.

2.3 数值计算流程

数值计算流程如图 1 所示. 首先设定流场参数 (气体温度、气体静态压力、声压级、频率等), 根据计算区域体积、颗粒数目浓度、取样颗粒数目权重, 计算得到取样颗粒数目, 并将这些取样颗粒均匀、随机地加满整个计算区域; 接着, 求解颗粒运动方程, 结合边界条件, 获得经 Δt 后颗粒新的位置和速度, 循环 n 次 ($n \geq 1$); 最后, 利用 DSMC 方法求解 $\Delta \bar{t} = n \Delta t$ 时间内颗粒的碰撞. 需要注意的是取样颗粒每

发生一次碰撞,对应于实际颗粒发生了 w 次碰撞 (w 为数目权重),据此统计真实颗粒的碰撞次数,返回求解颗粒运动方程,如此循环,直至达到指定的声场作用时间。

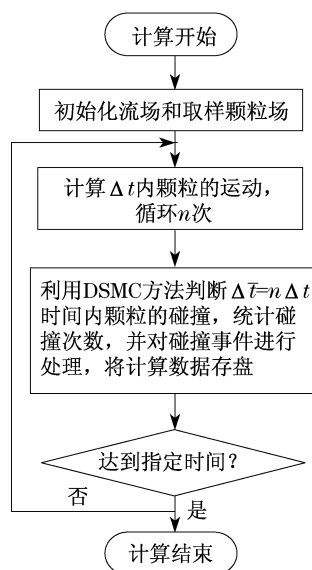


图1 计算流程

Fig.1 Computational procedure

3 结果与讨论

3.1 声场中颗粒容积份额的演变

在 $L = 155$ dB, $w = 1\,000$, $n_c = 100$, $\Delta \bar{t} = \Delta t$ 情况下,对声场频率分别为 2, 4, 6 kHz 时颗粒碰撞过程进行研究,得到的颗粒容积份额随时间的演变如图 2(a)~(c)所示.图中纵坐标 φ 表示颗粒容积份额,其为一定容积内实际颗粒所占的体积百分率,通过将计算区域沿声波波动方向划分为 20 个相同的子区域,基于这些子区域计算获得.由图 2(a)可见, $t = 0$ 时颗粒分布较为均匀,颗粒容积份额在 $4.95 \times 10^{-15} \pm 1.61 \times 10^{-16}$ 范围内,这说明颗粒初始分布合理;在声场作用时间为 0.5 s 时,波节位置 ($x/\lambda_{2k} = 0.5$) 附近颗粒容积份额升高,波腹位置 ($x/\lambda_{2k} = 0.25, 0.75$) 附近颗粒容积份额下降,不同位置的颗粒容积份额出现明显差异;在声场作用时间为 1.0 s 时,波节和波腹附近颗粒容积份额的差异进一步扩大,究其原因是在驻波声场中不同位置处颗粒动力学特性不同.文献[17]的研究结果表明,声波波动方向上,初始位置在波节点的颗粒不发生运动,初始位置在波腹点的颗粒发生往复振动,初始位置偏离波节和波腹点的颗粒边往复振动,边向最近的

波节点发生漂移.颗粒的定向漂移引起颗粒的空间分布发生改变,带来颗粒在波节点的汇聚.对比图 2(a)~(c)可以看出,声场频率对颗粒容积份额分布有重要影响,频率越大,声场中不同区域颗粒容积份额的差异越大.这是因为频率增大引起波长减小,从而相同区域内波节点个数增多,颗粒与其定向漂移所指向的汇聚点间距减小,在相同时间内,更多颗粒能够到达波节附近,因而加剧了颗粒空间分布的不均匀性,使得不同位置颗粒容积份额差异增大.

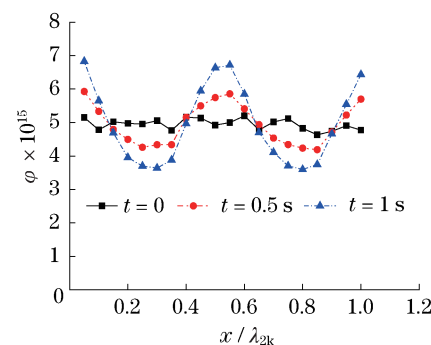
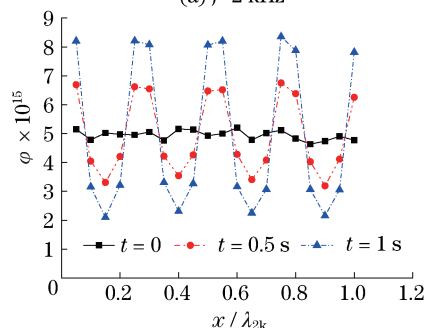
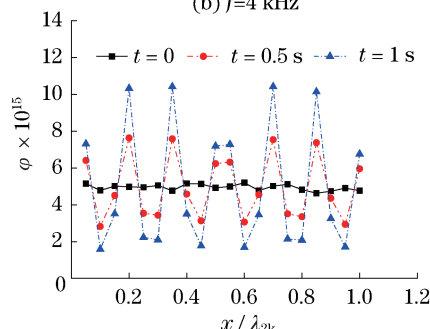
(a) $f=2$ kHz(b) $f=4$ kHz(c) $f=6$ kHz

图2 不同频率的声场中颗粒容积份额的演变

Fig.2 Evolution of particle volume fraction at different acoustic frequency

3.2 特征参数对碰撞率和计算时间的影响

3.2.1 数目权重对碰撞率和计算时间的影响

在 DSMC 方法中取样颗粒数目权重越小,意味着计算区域内取样颗粒数目越多,数值模拟结果越准确;但数目权重的减小必然会引起数值计算时间的增加.对颗粒的碰撞进行数值模拟,统计碰撞次

数,得到单位时间内、单位体积上真实颗粒的平均碰撞次数,即颗粒碰撞率.图3给出了 $L = 155$ dB, $n_c = 100$, $\Delta \bar{t} = \Delta t$, $t = 1$ s,声场频率分别为2,4,6 kHz条件下,数目权重对碰撞率和计算时间的影响.由图3(a)可知,取样颗粒数目权重在1 000~9 000范围变化时, $f = 2$ kHz条件下,随着数目权重的增加,碰撞率有所下降;相对于 $w = 1\ 000$ 时, $w = 9\ 000$ 时碰撞率降低了35.4%.然而,在 $f = 4, 6$ kHz条件下,数目权重对碰撞率的影响则很小,相对于 $w = 1\ 000$ 时,在数目权重变化过程中碰撞率的相对变化量分别不超过4.12%和3.83%.对比不同频率下的碰撞率可以发现,频率越大,颗粒碰撞率也越大.其原因是频率越大,在计算区域内颗粒的汇聚点就越多,在汇聚点附近颗粒容积份额也越大(见图2),颗粒容积份额的增大引起颗粒碰撞率的增加.由图3(b)可以看出,随着取样颗粒数目权重的增加,计算时间迅速减小,声场频率对计算时间的影响可以忽略.由此可以推断,计算时间主要取决于计算区域内取样颗粒的数目,局部颗粒容积份额对计算时间的影响很小.综合考虑计算结果和计算时间,可知在初始颗粒一定时对声场中颗粒碰撞过程进行数值模拟存在一个适宜的数目权重,在这个数目权重下既能获得较好的数值模拟结果,又能在很大程度上降低计算时间.本模拟条件下,取样颗粒数目权重为4 000左右时最为适宜.

3.2.2 网格数目对碰撞率和计算时间的影响

在DSMC方法应用中往往将颗粒碰撞局限在一个网格内,在这种情况下,网格数目将会对计算结果和计算时间带来很大影响.合理的网格数目选择不仅能够使计算结果更准确,还能够减少数值模拟的时间成本.在 $L = 155$ dB, $w = 4\ 000$, $\Delta \bar{t} = \Delta t$, $t = 1$ s,声场频率分别为2,4,6 kHz时得到的网格数目对碰撞率和计算时间的影响如图4所示.由图4(a)可知,随着计算区域内网格数目的增加,碰撞率急剧减少.这是由于网格数目越多,每个网格内的取样颗粒就越少,颗粒之间碰撞几率随之减少,导致碰撞率下降.由图4(b)可以看出,随着网格数目的增加,在2 kHz时,计算时间迅速减小,而后趋于一定值;在4 kHz与6 kHz时,网格数目一定的情况下,计算时间基本一致,随网格数目的增加,计算时间先减小,而后略有增加.尽管从时间成本上看,网格数目在200左右为宜,然而为使声场中颗粒凝并的数值模拟和实验结果定量一致,获得准确的碰撞率尤为重要.由于网格数目对碰撞率影响很大,通过调整网

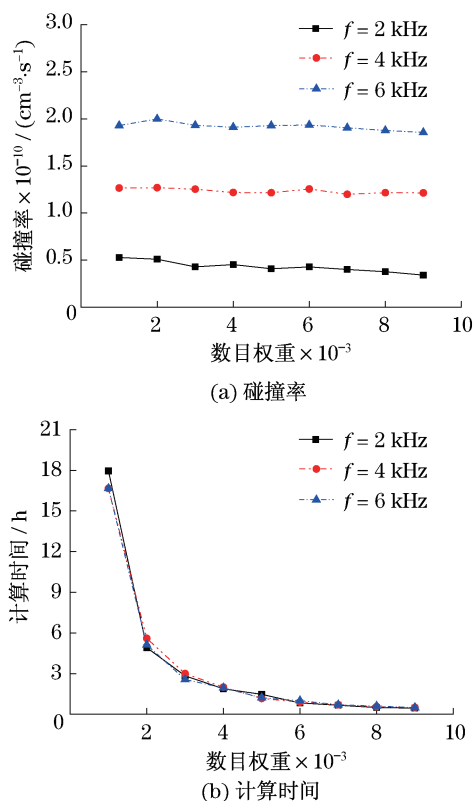


图3 数目权重对碰撞率和计算时间的影响

Fig.3 Influence of the weight value of the sampling particles' number on the collision rate and computational time

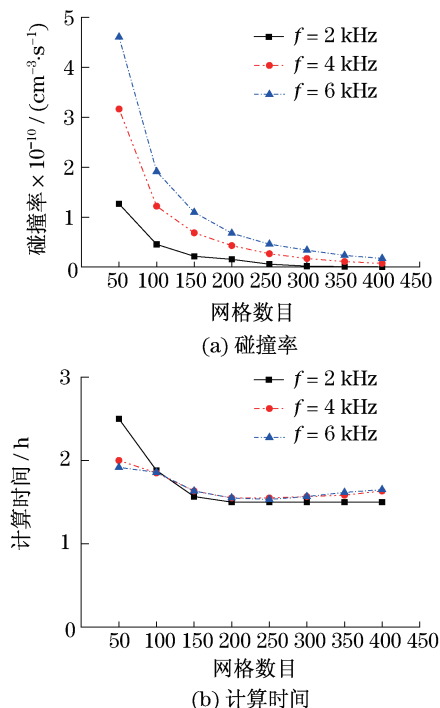


图4 网格数目对碰撞率和计算时间的影响

Fig.4 Influence of the cell number on the collision rate and computational time

格数目能够有效地改善模拟准确性。

3.2.3 碰撞时间步长对碰撞率和计算时间的影响

在同时求解颗粒运动和碰撞时,需要考虑两个时间步长——颗粒运动时间步长 Δt 和颗粒碰撞时间步长 $\Delta \bar{t}$ 的选取。从颗粒运动的角度看,为保证计算结果准确, Δt 应满足 $\Delta t \ll \tau_p$ (τ_p 为颗粒的弛豫时间);从 DSMC 方法求解颗粒碰撞的角度看, Δt 应使得给定比例的颗粒不超出网格边界, $\Delta \bar{t}$ 应满足对于任意取样颗粒 i 总有 $P_i < 1$ 。在本文研究的颗粒和声场条件下,满足 DSMC 方法需要的时间步长远大于满足准确求解颗粒运动方程的时间步长。为提高计算效率,研究碰撞时间步长对碰撞率和计算时间的影响。图 5 给出了声场频率分别为 2, 4, 6 kHz 情况下碰撞时间步长与运动时间步长之比 $\Delta \bar{t} / \Delta t$ 对颗粒碰撞率和计算时间的影响。由图 5(a) 可以看出,频率为 2 kHz 时,随着碰撞时间步长的增加,颗粒碰撞率单调增加;频率为 4 kHz 和 6 kHz 时,随碰撞时间步长的增加,碰撞率先增加而后出现波动。图 5 还表明,调整碰撞时间步长,碰撞率的变化有限(图 5(a));在 $\Delta \bar{t} / \Delta t$ 由 1 增加至 5 时,计算时间急剧下降,而后继续增加 $\Delta \bar{t}$,计算时间仅略有

减少,由此可推断 $\Delta \bar{t} / \Delta t > 5$ 对降低数值模拟时间代价的意义不大,选择 $\Delta \bar{t} / \Delta t \approx 5$ 为宜。

4 结 论

综合考虑颗粒受到的 Stokes 力、压力梯度力、虚拟质量力、Basset 力、重力和浮力,建立颗粒运动模型,基于 DSMC 方法模拟声场中颗粒的碰撞过程,获得颗粒碰撞率和计算时间受 DSMC 方法中特征参数(时间步长、数目权重、网格数目)的影响规律,得到以下结论:

- 相同声场作用时间下,频率越大,颗粒容积份额变化越迅速,颗粒空间分布也越不均匀;声场频率对碰撞率有显著影响,而对计算时间的影响很小。
- 取样颗粒数目权重增加,颗粒碰撞率的变化很小,计算时间则迅速降低;网格数目增加,碰撞率降低,计算时间先迅速降低,而后低频时基本不变,高频时略有上升。
- 随着碰撞时间步长的增加,低频声场中颗粒碰撞率单调增加,高频声场中颗粒碰撞率先增加而后出现波动;计算时间减少,减少量在碰撞步长较小时最为明显。

参考文献:

- [1] ZHANG L W, CHEN X, XUE X D, et al. Long-term exposure to high particulate matter pollution and cardiovascular mortality: a 12-year cohort study in four cities in northern China [J]. *Environment International*, 2014, 62: 41–47.
- [2] WANG T J, JIANG F, DENG J J, et al. Urban air quality and regional haze weather forecast for Yangtze River Delta region [J]. *Atmospheric Environment*, 2012, 58: 70–83.
- [3] WEN C, XU M H, YU D X, et al. PM_{10} formation during the combustion of N_2 -char and CO_2 -char of Chinese coals [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2013, 34(2): 2383–2392.
- [4] EHRlich C, NOLL G, KALKOFF W D, et al. PM_{10} , $PM_{2.5}$ and $PM_{1.0}$ —Emissions from industrial plants—results from measurement programmes in Germany [J]. *Atmospheric Environment*, 2007, 41 (29): 6236–6254.
- [5] WANG J, HU Z M, CHEN Y Y, et al. Contamination characteristics and possible sources of PM_{10} and $PM_{2.5}$ in different functional areas of Shanghai, China [J].

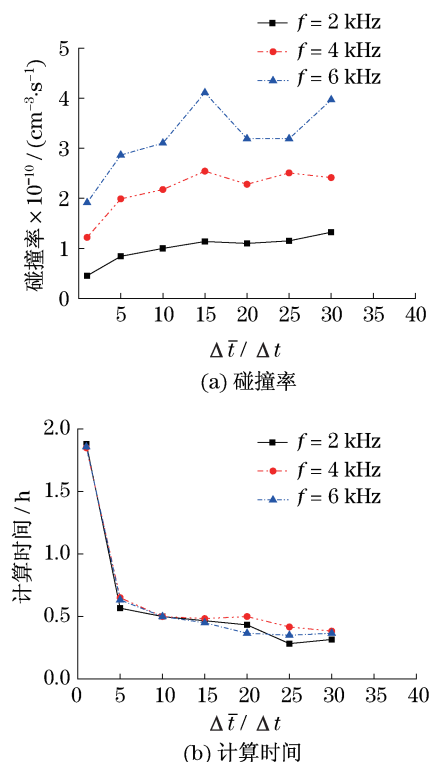


图5 碰撞时间步长对碰撞率和计算时间的影响
Fig.5 Influence of the time step for determining collision on the collision rate and computational time

- Atmospheric Environment, 2013, 68: 221 - 229.
- [6] 杨林军. 燃烧源细颗粒物污染控制技术[M]. 北京: 化学工业出版社, 2011.
- [7] 胡惠敏, 李瑞阳, 蔡萌, 等. 声波与其他方法联合作用脱除细颗粒物的研究进展[J]. 上海理工大学学报, 2016, 38(1): 13 - 18.
- [8] 张明俊, 凡凤仙. 细颗粒物的声凝并数值模拟研究进展[J]. 化工进展, 2012, 31(8): 1671 - 1676.
- [9] SHENG C D, SHEN X L. Modelling of acoustic agglomeration processes using the direct simulation Monte Carlo method[J]. Journal of Aerosol Science, 2006, 37(1): 16 - 36.
- [10] SHENG C D, SHEN X L. Simulation of acoustic agglomeration processes of poly-disperse solid particles[J]. Aerosol Science and Technology, 2007, 41(1): 1 - 13.
- [11] 凡凤仙, 袁竹林. 外加声场对增加 $PM_{2.5}$ 碰撞几率的数值模拟研究[J]. 中国电机工程学报, 2006, 26(11): 12 - 16.
- [12] 凡凤仙, 袁竹林, 赵兵, 等. 驻波声场中细微颗粒凝并的数值模拟[J]. 燃烧科学与技术, 2008, 14(3): 253 - 258.
- [13] FAN F X, YANG X F, KIM C N. Direct simulation of inhalable particle motion and collision in a standing wave field[J]. Journal of Mechanical Science and Technology, 2013, 27(6): 1707 - 1712.
- [14] WEI J M. A fast Monte Carlo method based on an acceptance-rejection scheme for particle coagulation[J]. Aerosol and Air Quality Research, 2013, 13: 1273 - 1281.
- [15] HE Y X, ZHAO H B, WANG H M, et al. Differentially weighted direct simulation Monte Carlo method for particle collision in gas-solid flows[J]. Particuology, 2015, 21: 135 - 145.
- [16] KARCHANI A, MYONG R S. Convergence analysis of the direct simulation Monte Carlo based on the physical laws of conservation[J]. Computers & Fluids, 2015, 115: 98 - 114.
- [17] 宋晓通, 凡凤仙. 驻波声场中可吸入颗粒物漂移的影响因素分析[J]. 热能动力工程, 2016, 31(1): 81 - 86.
- [18] CLECKLER J, ELGHOBASHI S, LIU F. On the motion of inertial particles by sound waves[J]. Physics of Fluids, 2012, 24(3): 033301.
- [19] TSUJI Y, TANAKA T, YONEMURA S. Cluster patterns in circulating fluidized beds predicted by numerical simulation (discrete particle model versus two-fluid model) [J]. Powder Technology, 1998, 95(3): 254 - 264.
- [20] ROSTAMI M, ARDESHIR A, AHMADI G, et al. On the effect of gravitational and hydrodynamic forces on particle motion in a quiescent fluid at high particle Reynolds numbers[J]. Canadian Journal of Physics, 2008, 86(6): 791 - 799.

(编辑: 丁红艺)