

“十一五”国家重点图书出版规划项目



国家重点基础研究发展计划

燃烧源可吸入颗粒物的形成与控制技术
基础研究学术丛书

离散系统动力学演变过程 的颗粒群平衡模拟

赵海波 郑楚光 著



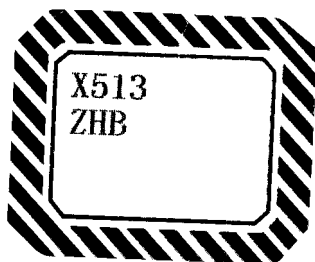
科学出版社

www.sciencep.com

“十一五”国家重点图书出版规划项目
燃烧源可吸入颗粒物的形成与控制技术基础研究学术丛书

离散系统动力学演变过程 的颗粒群平衡模拟

赵海波 郑楚光 著



科学出版社

北京

内 容 简 介

本书介绍了离散系统动力学演变过程颗粒群平衡模拟的基本概念、基础知识和最新研究进展,围绕颗粒群平衡模拟的三个主要研究内容,即动力学事件(包括颗粒碰撞、凝并、破碎、冷凝/蒸发、成核、沉积等)的核模型、颗粒群平衡方程的数值方法和颗粒群平衡模拟在复杂系统中的应用,进行了重点介绍,特别是有限惯性颗粒湍流碰撞核、零维颗粒群平衡模拟的多重 Monte Carlo 算法和事件驱动常体积法、多维颗粒群平衡模拟的多重 Monte Carlo 算法、颗粒群平衡模拟用于自然环境气溶胶和燃煤可吸入颗粒物等方面,详细介绍了作者最新的研究成果。

本书可供动力工程及工程热物理、化学工程、力学、数学、物理、核科学、大气物理化学、生物等领域从事颗粒群平衡模拟的相关科研人员、工程技术人员参考,同时也可供相关专业的研究生参考。

图书在版编目(CIP)数据

离散系统动力学演变过程的颗粒群平衡模拟/赵海波,郑楚光著. —北京:科学出版社,2008

(燃烧源可吸入颗粒物的形成与控制技术基础研究学术丛书)

ISBN 978-7-03-021606-9

I. 离… II. ①赵…②郑… III. 燃烧产物-粒状污染物-离散系统-系统动力学-平衡-模拟 IV. X513

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 048929 号

责任编辑:刘宝莉 / 责任校对:陈玉凤

责任印制:刘士平 / 封面设计:王 浩

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

中国科学院印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2008 年 4 月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2008 年 4 月第一次印刷 印张:17 3/4

印数:1—2 500 字数:336 000

定价:55.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈科印〉)

《燃烧源可吸入颗粒物的形成与控制技术 基础研究学术丛书》序

尽管进入 21 世纪,但是我国能源结构仍以矿物能源为主,煤炭和石油在很长时期内仍位居前列,由燃煤引起的 SO_2 、 NO_x 和颗粒物的污染仍是我国城市大气的主要污染来源。研究表明:我国大城市的主要污染物中,大约 50%~60%是由燃煤和机动车燃油引起的,特别是细粒子部分,其比例更高。尽管近年来各地都采取了一系列改善环境的措施,城市总悬浮颗粒物和可吸入颗粒物的总体污染情况有所好转,但是, $\text{PM}_{2.5}$ 特别是亚微米颗粒物的总量却没有下降,而是有所上升,这说明我国城市大气的主要污染物正在转向更细的颗粒物。因此,针对燃烧源排放的细微颗粒物的研究势在必行。

在科技部的支持下,围绕国家重点基础研究发展计划(973 计划)项目——“燃烧源可吸入颗粒物的形成与控制技术基础研究(2002CB211600)”组建了一支高水平的学术研究团队。经过五年的项目研究,他们在颗粒物的形成与控制基础两个方面都取得了重要的阶段性成果。这支团队由清华大学、北京大学、天津大学、华中科技大学、东南大学和中国环境科学研究院组成,每年举行一次超过 100 人的项目学术会议,形成了良好的学术交流氛围。在此项目研究期间,第一课题负责人郝吉明当选为中国工程院院士,第二课题负责人徐明厚成为“长江学者奖励计划特聘教授”和国家杰出青年科学基金获得者,首席科学家姚强在“十五”计划期间担任国家 863 洁净煤主题专家组成员、“十一五”计划 863 先进能源技术领域专家组成员兼工业领域节能减排总体专家组组长。

通过项目的研究,该学术团队提出了用于燃烧源颗粒物的采样、处理与分析的方法,例如,针对不同源与多种颗粒特性的撞击分离采样与分析系统、模拟大气过程的气溶胶综合反应箱、以显微 PIV 技术为核心的颗粒物在不同场中的运动规律的研究方法;研制搭建了一批具有国际先进水平的实验台架与测试仪器,例如,以全气缸取样为核心的柴油发动机颗粒物研究实验台,一维多燃料燃烧过程颗粒物形成与控制实验台, LII 碳黑形成与控制测量系统和煤的沉降炉实验台等。

到目前为止,关于此 973 计划项目取得主要研究成果如下:

(1) 完成了不同燃料、不同燃烧方式的 20 多种典型的固定源和 10 多种移动燃烧源(柴油车和汽油车)的可吸入颗粒物的粒径分级分布特性、形貌结构特性、主量化学组成、重金属富集特性和有机污染物在不同颗粒物上的富集特性等的研究;

对我国燃用两种典型煤种的电厂各项目组进行了联合测试,获得了大量有关我国主要燃烧源可吸入颗粒物的基础数据;同时还进行了大量的实验室基础实验研究,获得了我国主要典型燃烧源可吸入颗粒物的物理化学特性及其形成的基本规律。

(2) 通过对不同外部条件下可吸入颗粒物的多相流动、传热、传质与生长的规律的研究,以及在声场、电场、热温度场、磁场、相变环境、化学凝聚环境、自然环境等多种不同外力条件下的作用规律的实验和理论研究,首次获得了微米级颗粒在不同频率、不同声强的声场中不同位置的运动轨迹和团聚颗粒的运动轨迹,提出了一种确定粒径的新方法,并提出了相变、化学凝聚和预涂层技术等多个使颗粒团聚的技术研究方向。

(3) 通过实验与模型分析计算,建立了以通用颗粒物方程为基础的颗粒物在燃烧过程与降温排放过程中的气—液—固相互转化的物理化学机制,包括气化、成核、长大、非均相反应、团聚等的形成与转化规律。研究包括了复杂的物理化学过程,如各种物质的挥发行为及其转化行为,半挥发性和挥发性组分,特别是有机污染物的变化行为等,发现了燃烧源颗粒的三模态特性可以用铝元素作为标志性元素进行相关的表征,很好地解释了中间模式形成的机理。

(4) 根据可吸入颗粒物在产生、运动与演化过程中发生的一系列的碰撞和团聚,很好的预测了在降水过程中不同颗粒物的湿沉降,获得了碳烟(soot)形成过程的机理与主要影响因素,以及前体物在环境大气条件下转化为颗粒物的主要影响因素(包括温度、湿度等条件),并提出了在柴油机燃烧条件下控制碳烟形成的主要因素。

(5) 通过采用先进的在线观测技术研究颗粒物在大气环境中的演变规律,对细和超细粒子数浓度谱分布的连续在线观测发现了北京新粒子的形成,对北京大气中二次颗粒物的形成规律有了新的认识。

(6) 通过对不同荷电颗粒运动的研究,发现了荷电颗粒物在两相流动中两两相关的互相吸引、排斥、缠绕等规律;通过对微米级颗粒在碰撞与团聚的动力学过程的研究,发现了形成颗粒层结构与颗粒荷电、颗粒其他特性的关系,提出了微米颗粒动力学研究的新方法,为新型的电袋联合脱除技术的发展提供了基础数据,指明了新的研究方向(此方向已获得科技攻关计划的支持)。

(7) 通过对内燃机颗粒物的过滤、催化氧化、等离子氧化等基本规律的研究,形成了具有催化过滤和等离子再生两项技术途径的颗粒物脱除与再生的新方法。

作为这一项目专家组的成员,本人一直跟踪这一项目的进展情况,上述成果表明将这一问题列入国家重大基础研究计划的正确性。这次科学出版社与项目组合作,共同将上述主要成果体现在一套丛书之中,是一件非常有意义的事。这套丛书是对五年基础研究成果的一个总结,为读者提供了关于燃烧源颗粒物从形成到排

放控制的系统知识。丛书介绍了该项目最具代表性的研究方法、研究手段和研究成果,同时在编写上既考虑了专业研究人员的需要,又考虑了普通读者的需求。整套丛书系统性和针对性强,对未来从事颗粒物形成、排放与控制的研究和技术开发的科技人员有着重要的参考价值。衷心希望研究工作能够继续深入,愿本丛书的出版对读者了解燃烧源颗粒物的形成规律和控制技术有所帮助,并进一步推动该领域的研究和技术发展。

徐旭常

中国工程院院士

2008年5月于清华大学

前 言

颗粒群平衡模拟(PBM)被广泛应用于各种工程和科学领域,它定量描述离散系统中颗粒的碰撞、凝并、破碎、冷凝/蒸发、成核、沉积等动力学事件,从而获取颗粒尺度分布的演变过程。描述颗粒尺度分布的时间演变过程实际上是研究一个被认为空间各向同性的零维颗粒群系统,如果把描述颗粒尺度分布时间演变的模型与多相湍流模型耦合起来,可以描述多维空间系统中颗粒尺度分布的时间和空间演变过程。本书为围绕零维颗粒群平衡模拟和多维颗粒群平衡模拟的核模型、数值方法和工程应用等阐述国际上最新研究进展和我们最新的研究成果。

本书共分为6章,第1章介绍颗粒群平衡模拟的基本概念和基础知识,指出颗粒群平衡模拟的难题和目前的研究进展;第2章介绍各种动力学事件的核模型,包括我们利用直接数值模拟在有限惯性颗粒湍流碰撞核模型方面所做的工作;第3章介绍零维颗粒群平衡模拟的数值方法,主要是对目前已有方法的综述;第4章则介绍我们在零维颗粒群平衡模拟的随机模型方面所做的工作;第5章进而介绍我们发展的多维颗粒群平衡模拟的随机模型,构建了颗粒群平衡模拟与四向耦合多相湍流模型的联系;第6章介绍我们发展的颗粒群平衡模拟随机模型的工程应用和研究展望。本书第2章中有限惯性小颗粒湍流碰撞核部分引用柳朝晖教授所指导的陈胤密硕士和李瑞霞硕士的部分研究工作,其他内容均由赵海波独立撰写,其中郑楚光全面指导了颗粒群平衡模拟这一工作的开展。书稿的组织、统稿、校核等工作由赵海波完成。

本书的出版,离不开国内外同行的帮助。在进行PBM的Monte Carlo方法的定量比较和定性分析的工作中,Themis Matsoukas博士(Department of Chemical Engineering, Pennsylvania State University, USA)和Arkadi Maisels博士(Process Technology, Degussa AG, Germany)与作者进行了深入的学术交流,共同完成了此项工作;在进行降雨过程气溶胶湿沉降的工作时,北京大学大气环境系秦瑜教授以其深厚的专业造诣给予作者极大的帮助;在PBM研究的起始阶段,清华大学核能院的于溯源教授与作者进行了讨论,并邮寄了资料;清华大学热能工程系姚强教授在主持973项目“燃烧源可吸入颗粒物的形成与控制技术基础研究(2002CB211600)”期间、本实验室徐明厚教授在主持该973子课题“燃烧源一次颗粒物的生成、成核与生长机制(2002CB211602)”期间,均对作者的研究课题给予了科学的建议。借此机会对以上研究者表示深深的谢意。本书的出版同样离不开煤燃烧国家重点实验室和我们课题组打下的坚实的基础。在课题组多位老师和历届

博士生、硕士生的共同努力下,我们在气固两相流的雷诺应力-概率密度函数两相湍流模型、视密度加权平均两相湍流模型、直接数值模拟、大涡模拟、格子-玻尔兹曼模拟等方面都进行了相关工作,这些工作为本书的主要内容——离散系统动力学演变过程的颗粒群平衡模拟——打下了坚实的基础或对本书所述论题作了实质性工作,参与这些工作的研究者包括柳朝晖教授、郭照立教授、张军营教授、郑瑛教授、周向阳博士、邹春副教授、张立麒副教授、郭欣副教授、刘晶副教授、于勇博士、王汉封博士、贺铸博士、陈胤密硕士、李瑞霞硕士等。因此,本书是集体智慧的结果。

本书研究内容得到了如下课题的资助:国家重点基础研究规划项目(973)“燃烧源一次颗粒物的生成、成核与生长机制(2002CB211602)”、国家自然科学基金面上项目“颗粒尺度分布时间和空间演变过程的 Monte Carlo 描述(20606015)”、国家自然科学基金重点项目“西部煤中矿物质及特有污染组分在燃烧与转化过程中的迁徙、演化行为(90410017)”、973 课题“燃煤重金属脱除(2006CB200304)”、“燃煤 CO_2 分离与富集(2006CB705807)”、霍英东教育基金“复杂多相流动与化学反应体系的基础研究(114017)”等。

目前国内有许多关于多相流方面的专著出版,本书内容也可属于多相流领域的宏观数值模拟,但是目前尚没有专著对颗粒群平衡模拟进行系统的介绍,我们希望本书的出版能够做到抛砖引玉的作用,希望颗粒群平衡模拟能够在一定程度上得到国内同行的关注,并共同促进颗粒群平衡模拟在国内的发展,使其能够在各个自然和工程领域得到应用,为实际工作提供解决办法。

由于作者水平有限,对这个博大精深且高速发展的领域仅仅只有几年的研究积累,对于该领域的某些关键问题尚处于探索阶段和研究阶段,特别是我们关于多变量颗粒群平衡模拟和多维多变量颗粒群平衡模拟的工作还正在开展之中,书中肯定存在不足之处,恳切希望读者能够通过如下联系方式将意见反馈给我们,以此指导和促进我们今后的工作: hzhao@mail. hust. edu. cn 或华中科技大学煤燃烧国家重点实验室 赵海波(430074)。

目 录

《燃烧源可吸入颗粒物的形成与控制技术基础研究学术丛书》序

前言

1 绪论	1
1.1 离散系统动力学演变过程	1
1.1.1 离散系统的动力学事件	2
1.1.2 离散系统动力学演变过程的基本特点	7
1.2 四向耦合的两相湍流模型	9
1.2.1 双流体模型	10
1.2.2 流体-轨道模型	11
1.3 颗粒群平衡模拟	13
1.3.1 零维颗粒群平衡模拟	15
1.3.2 多维颗粒群平衡模拟	17
1.4 本书的主要结构	18
参考文献	20
2 典型动力学事件的核模型	25
2.1 碰撞	25
2.1.1 基础知识	25
2.1.2 布朗碰撞核	28
2.1.3 湍流碰撞核	30
2.1.4 有限惯性小颗粒($St_k < 1$)湍流碰撞核半经验模型	34
2.1.5 有限惯性颗粒碰撞核的推荐模型	43
2.1.6 布朗运动和湍流运动共同作用下的碰撞核	46
2.2 凝并	46
2.2.1 碰撞效率	46
2.2.2 凝并效率	47
2.3 球化	48
2.4 冷凝/蒸发	49
2.5 成核	50

2.6	沉积	51
2.7	破碎	52
2.8	其他动力学事件	52
2.9	小结	53
	参考文献	53
3	颗粒群平衡模拟的数值方法	58
3.1	颗粒尺度分布函数动力学演变的特征	58
3.2	矩方法	60
3.2.1	传统矩方法	60
3.2.2	积分矩方法	62
3.2.3	直接积分矩方法	65
3.2.4	内插封闭矩方法	67
3.2.5	矩方法小结	69
3.3	分区法	70
3.3.1	基于数密度积分中值定理的分区法	71
3.3.2	基于核积分中值定理的分区法	75
3.3.3	分区法小结	79
3.4	Monte Carlo 方法	79
3.4.1	时间驱动 Monte Carlo 方法	80
3.4.2	事件驱动 Monte Carlo 方法	82
3.4.3	常体积法	85
3.4.4	常数目法	86
3.4.5	强核函数法	89
3.4.6	质量流量法	90
3.4.7	Monte Carlo 方法小结	91
3.5	小结	92
	参考文献	93
4	零维颗粒群平衡模拟的 Monte Carlo 方法	103
4.1	多重 Monte Carlo 算法的发展	104
4.1.1	子系统和整体系统	104
4.1.2	加权虚拟颗粒	105
4.1.3	子系统、整体系统和异数目权值虚拟颗粒群的统一	107
4.1.4	多重 Monte Carlo 算法流程	109

4.1.5	时间步长	111
4.1.6	凝并事件的处理	114
4.1.7	破碎事件的处理	116
4.1.8	冷凝/蒸发(表面生长/消融)事件的处理	118
4.1.9	沉积事件的处理	118
4.1.10	成核事件的处理	119
4.2	多重 Monte Carlo 算法的验证	120
4.2.1	纯凝并工况	120
4.2.2	纯破碎工况	124
4.2.3	同时发生的凝并和破碎	127
4.3	多重 Monte Carlo 算法小结	133
4.4	零维颗粒群平衡模拟 Monte Carlo 方法的性能定量评判方法	134
4.4.1	为什么要进行几种 Monte Carlo 方法的定量比较	134
4.4.2	Monte Carlo 方法定量比较的策略	135
4.4.3	Monte Carlo 方法的性能定量评判准则	136
4.5	几种主流 Monte Carlo 方法的比较	137
4.5.1	纯凝并工况	137
4.5.2	纯破碎工况	146
4.5.3	纯冷凝/蒸发(或生长)工况	148
4.5.4	纯成核工况	150
4.5.5	纯沉积工况	151
4.5.6	讨论	152
4.6	多重 Monte Carlo 算法的改进	153
4.6.1	算法改进的出发点	153
4.6.2	改进的多重 Monte Carlo 算法对凝并事件的描述	155
4.6.3	改进的多重 Monte Carlo 算法对破碎事件的描述	161
4.6.4	改进的多重 Monte Carlo 算法对沉积事件的描述	162
4.6.5	改进的多重 Monte Carlo 算法对成核事件的描述	162
4.7	改进的多重 Monte Carlo 算法的验证和比较	162
4.7.1	Case1, 初始单分散性颗粒群, 常凝并核	163
4.7.2	Case2, 初始指数分布多分散性颗粒群, 常凝并核	167
4.8	改进的多重 Monte Carlo 算法小结	168
4.9	事件驱动常体积法的发展	169

4.9.1	发展事件驱动常体积法的出发点	169
4.9.2	动力学事件的发生速率	170
4.9.3	等待时间的计算	173
4.9.4	主事件的选择	173
4.9.5	主颗粒的选择	174
4.9.6	虚拟颗粒数目的恢复和计算区域体积的保持	176
4.9.7	事件驱动常体积法的流程	177
4.10	事件驱动常体积法与几种主流 Monte Carlo 方法的比较	179
4.10.1	Case1, 初始单分散性颗粒群的常凝并核工况	179
4.10.2	Case2, 初始指数分布多分散性颗粒群的常凝并核工况	180
4.10.3	Case3, 初始单分散性颗粒群的多元破碎工况	182
4.11	事件驱动常体积法小结	183
	参考文献	184
5	多维颗粒群平衡模拟的 Monte Carlo 方法	187
5.1	多维颗粒群平衡模拟的关键问题	187
5.2	多维颗粒群平衡模拟的多重 Monte Carlo 算法	191
5.2.1	雷诺应力模型描述流体相运动	191
5.2.2	拉格朗日 Langevin 方程描述颗粒相运动	193
5.2.3	数值模拟的流程	194
5.2.4	多重 Monte Carlo 算法描述颗粒动力学演变	195
5.3	多维多重 Monte Carlo 算法的验证	203
5.3.1	计算工况	203
5.3.2	考虑颗粒碰撞的多维多重 Monte Carlo 算法的验证	205
5.3.3	考虑颗粒凝并的多维多重 Monte Carlo 算法的验证	209
5.4	小结	212
	参考文献	213
6	颗粒群平衡模拟的应用和展望	218
6.1	降雨过程中气溶胶湿沉降的数值模拟	218
6.1.1	降雨对气溶胶湿去除过程的数学模型的建立	219
6.1.2	多重 Monte Carlo 算法对颗粒湿沉降事件的特殊处理	223
6.1.3	描述气溶胶湿沉降的多重 Monte Carlo 算法的验证	225
6.1.4	降雨类型对气溶胶湿去除效果的影响	226
6.1.5	雨滴尺度谱对气溶胶湿去除效果的影响	229

6.1.6 小结	233
6.2 紧凑型混合颗粒收集器对燃煤锅炉飞灰颗粒收集过程的数值模拟	235
6.2.1 静电除尘器的数学模型和模拟方法	236
6.2.2 静电增强布袋除尘器的数学模型和模拟方法	240
6.2.3 紧凑型混合颗粒收集器除尘过程的数值模拟	243
6.2.4 小结	248
6.3 颗粒碰撞对两相湍流流场的影响分析	249
6.3.1 模拟细节	249
6.3.2 模拟结果及分析	250
6.3.3 小结	253
6.4 展望	254
6.4.1 多变量颗粒群平衡模拟	254
6.4.2 多维多变量颗粒群平衡模拟	256
6.4.3 颗粒群平衡模拟的应用领域	257
参考文献	257
附录	264
附录1 主要专业术语和英文缩写	264
附录2 主要符号表	265

1 绪 论

自然和工程领域广泛存在着复杂的多相流体系统,其基本特点是连续相(通常为气体或液体)携带大量的离散相颗粒群(通常为气体中的固体颗粒或液滴,或液体中的固体颗粒或气泡等)一起运动,连续相与离散相之间、离散相与离散相之间存在非线性、非平衡、非均匀、非稳态、多尺度的相互耦合作用。对这种颗粒流体系统(或称为离散系统)进行数值模拟和定量描述有利于揭示复杂系统的内部机理和规律、优化操作条件、指导系统设计和实验设计、进行模型参数辨识等。离散系统数值模拟的难点之一在于其复杂的动力学演变过程,包括颗粒碰撞、凝聚、破碎、冷凝/蒸发、成核、沉积、表面化学反应等物理化学过程。本章首先对离散系统及其动力学演变过程进行介绍,然后分别介绍两种可行的宏观数值模拟方案——四向耦合多相湍流模型和颗粒群平衡模拟,最后对本书主要结构和特色进行归纳总结。

1.1 离散系统动力学演变过程

离散系统广泛存在于自然环境、工业过程甚至社会领域中。在自然环境中,小到大气气溶胶的生成、生长和演变,或雨、雾、冰雹等的形成和降落,甚至海水泡沫破灭形成的盐晶颗粒,大到宇宙中星体的碰撞、爆炸等,均可纳入离散系统的研究范畴。工程领域中存在的离散系统更是数不胜数,所涉及的学科门类包括燃烧[如燃烧合成纳米颗粒;soot(碳烟)和 PAH(多环芳烃)的生成长大;固定源和移动源燃烧装置中可吸入颗粒物的生成、生长和迁徙;煤燃烧过程中微量重金属在可吸入颗粒物上的富集;内燃机喷雾燃烧;火灾过程中烟雾和碳黑的生成等]、公共健康(如室内气溶胶、烟草颗粒的成核、团聚等微物理化学过程)、化学工程(如流化床、精馏塔等过程设备中团聚体和气泡的破碎和聚并等;乳化液滴颗粒的聚合和表面化学反应等;结晶过程中晶体的生成和生长等;纳米粉体制备过程中的快速化学反应、凝并固化、摩擦破碎和干燥等;胶体的团聚、微混合和球化及结构重建现象,异类液相萃取过程中液滴颗粒的聚并、破碎、相间质量交换和相分离等)、一般工业工程(如焊接过程中飞溅的金属颗粒;交变电场或者声场中的粉尘或烟尘的聚并等)、生物医学工程(如细胞的生成、生长和分裂以及内部蛋白质组分如 DNA 和 RNA 的再分布等)、核工程(如核反应堆的安全性分析中,模拟爆炸过程中放射性颗粒的扩散沉降过程等)等领域。而社会和交通领域中物流、人流、车流的统计分析等,也可以借鉴离散系统的概念。

离散系统包括连续相和离散相,其所表现的宏观现象是连续相与离散相、离散相与离散相之间相互作用的结果。连续相本身的运动规律,特别是湍流现象,一直是几个世纪以来的研究热点,也是尚未解决的科学问题之一。已经发展了很多数学模型和方法来描述连续相湍流运动,如湍流模式理论(包括工程中广泛应用的 $k-\epsilon$ 模型、雷诺应力模型、代数应力模型等)^[1~4]、大涡模拟^[5~7]、直接数值模拟^[8,9]、格子-玻尔兹曼方法^[10]、离散涡模拟^[2]、拟颗粒模拟^[11]等。而对于离散相的描述,大致可以分为两大类方法^[12]:基于欧坐标体系的拟流体模型和基于拉格朗日坐标体系的轨道模型。拟流体模型把颗粒相看作与流体相互相渗透、相互作用的连续介质,而轨道模型把颗粒相当作离散的群,它沿着颗粒轨道跟踪颗粒的运动和动力学行为,随机性轨道模型、确定性轨道模型、拉格朗日 Langevin 方程等均属于轨道模型。连续相与离散相之间的相互作用、相互耦合,即双向耦合(two-ways coupling)是多相湍流模型的关键之一,经过国内外诸多学者的努力,双向耦合多相湍流模型已经在工程领域较为普及,对于一些复杂系统,如流化床^[11]、煤粉燃烧^[12]、沸腾传热^[13],均能达到较高的模拟精度。

然而,对于离散系统而言,仅仅描述连续相、离散相以及连续相和离散相的双向耦合尚不足以对系统进行定量描述,离散系统的核心内容是离散相和离散相之间的相互作用。这种相互作用对于多相湍流模型而言,可以归纳为“四向耦合”(four-ways coupling)效应,或者专门称之为离散系统的动力学演变。本书的重点即离散系统的动力学演变过程。

1.1.1 离散系统的动力学事件

对于离散系统进行数值模拟和定量描述,重点关注的是离散单元(如离散的固体颗粒、液滴或气泡等)所经历的各种动力学事件[包括碰撞、凝并(或团聚、凝聚等)、(异相)冷凝/蒸发(或表面生长/消融)、(均相)成核、沉积(或清除、沉降等)、迁移(流入/流出)等]。通过统计离散单元(为简便起见,本书一般采用颗粒来指代离散单元)可以获取离散颗粒群的内部变量[internal variables,通常为单组分颗粒的尺度,也可包括多组分颗粒尺度、表面积、孔隙率、分形维数等;相应地,把颗粒位置、速度等称为外部变量(external variables)]的分布函数的时间和空间演变过程,其中最受关注的是颗粒尺度分布函数的时间和空间演变过程,即具有某个尺度的颗粒的数目浓度在时空坐标中的变化。由于离散颗粒群的宏观性质,如光散射、电荷吸附、毒性、辐射性、沉积率、捕捉策略、颗粒产品的品质等都与离散颗粒群内部变量的分布函数紧密相关,所以其分布模型便成为研究离散颗粒系统的一个关键,可以采用离散颗粒群内部变量的分布函数的时空演变过程来量化离散系统的动力学演变过程。

通常,离散颗粒的动力学事件不仅与离散颗粒群本身属性紧密相关,也同时受

控于连续相的运动规律。下面对几个主要的动力学事件进行简单介绍。

1) 碰撞

颗粒碰撞(collision)是离散系统最常见和最关键的动力学事件之一。所谓碰撞,是指两个或两个以上的颗粒发生相互接触并分离开来的过程,碰撞前后颗粒本身的质量并无变化,但是颗粒之间存在动量和能量的交换,碰撞前后颗粒速度将发生改变,碰撞过程通常满足动量守恒定律。本书只考虑二元碰撞,其碰撞过程如图 1.1 所示。碰撞并不改变颗粒总数目和参与碰撞事件的颗粒的质量,但是改变参与碰撞事件的颗粒的动力学特性,所以碰撞导致颗粒尺度分布的空间演变而不影响颗粒尺度分布的时间演变。

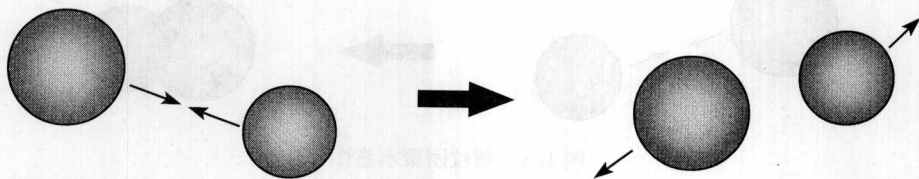


图 1.1 颗粒碰撞示意图

处理颗粒碰撞过程的模型可以分为两类,即软球模型和硬球模型^[11,14~16]。软球模型也可称为离散单元法(discrete element method, DEM),它将颗粒视为有弹性的物体,颗粒碰撞过程具有一定的接触时间,并通过弹性、阻尼和滑移的力学机理来计算接触力,其中弹性用于模拟变形效应,阻尼用于模拟缓冲效应。软球模型可以考虑多体碰撞,并通常将接触力与其他外力进行矢量叠加,将颗粒的悬浮过程与碰撞过程综合考虑,统一到牛顿第二定律中,以描述颗粒的位移和速度变化。硬球模型则假设颗粒之间的碰撞是有序的瞬时二体接触,并采用动量守恒定律来处理颗粒之间的相互作用,碰撞之后颗粒的平动速度和角速度可以由碰撞前的颗粒运动状态、恢复系数和摩擦系数来确定^[17]。

2) 凝并

颗粒凝并事件普遍存在于细微颗粒物演变过程中。所谓凝并,是指两个或两个以上的颗粒发生碰撞而粘结在一起而形成一颗尺度更大的颗粒。本书只考虑最常见的二元凝并。通常来说,如果事件发生前后的颗粒均为球形颗粒,可称为凝并(coagulation),如图 1.2 所示,它常见于液滴和熔融颗粒之间的相互作用;而如果两颗颗粒粘结在一起而生成不规则体的大颗粒,则这种事件依据不同的学科或工程领域可以称为聚结(coalesce)、团聚(agglomeration)、聚集(aggregation)、絮凝(flocculation)等,如图 1.3 所示,它常见于燃烧、胶体、结晶、造粒等领域中细微颗粒物的相互作用。实际上,可以通过质量分形维数(mass fractal dimension, D_f)把不规则颗粒团按照球形颗粒进行处理,此时不规则颗粒的当量体积为 $v = \pi d^{D_f} / 6$,

对于球形颗粒, $D_f=3$ 。本书把这类事件一般统称为凝并事件。

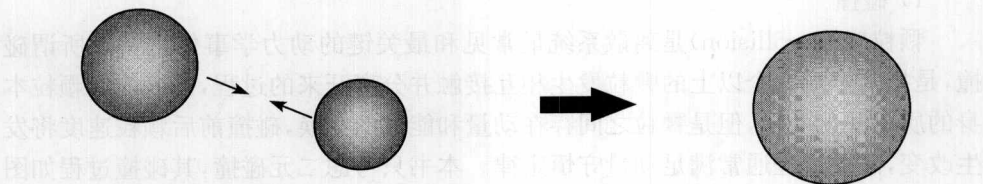


图 1.2 颗粒凝并示意图

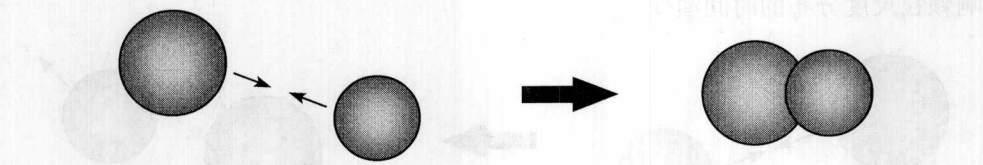


图 1.3 颗粒团聚示意图

一次二元凝并事件之后颗粒群总数目减一而总质量不变,参与事件的颗粒的动力学特性(如速度、动能等)均会发生变化,所以凝并事件导致颗粒尺度分布的时间和空间演变。通常认为凝并事件前后遵循动量守恒定律。

颗粒凝并事件一定是由于碰撞事件所引起的,但是并非所有的碰撞事件均直接导致凝并事件。凝并核模型由三个相互关联的模型决定^[18]:几何碰撞率、碰撞效率、凝并效率。颗粒几何碰撞率描述了颗粒之间在同一时刻理论上轨道发生交叉的概率^[19~28]。实际上,因为颗粒与颗粒之间存在范德华力的影响,也因为颗粒空隙之间湍流对颗粒的作用,在理论上同一时刻轨道交叉的颗粒可能会相互滑移开来,并不发生真正的碰撞,这可以通过碰撞效率模型^[29~35]来考虑。布朗扩散、湍流聚集效应、湍流输运效应、静电吸附等机理是决定几何碰撞率和碰撞效率的关键。即使颗粒之间发生碰撞,也可能存在弹性或非弹性碰撞、凝并、破碎等结果,可以提出一个考虑颗粒之间各种相互作用力和颗粒流体黏性、温度等属性的凝并效率模型^[29,33,36]。在第2章中将详细描述这些模型。

颗粒碰撞和凝并事件均涉及两颗已存在的颗粒,故可称之为双颗粒事件。双颗粒事件的主要机理包括湍流作用(turbulent effect)和布朗扩散(Brownian diffusion)。

3) 球化

球化(spheroidization)事件是指不规则的团聚体表面积动态变化(通常为表面积随时间缩小)而其总质量保持不变的过程,这个过程可能是由于温度升高过程中颗粒表面张力所引起的,很多领域也称该事件为烧结(sintering)事件,如图1.4所示。该事件常见于燃烧过程中 soot 生成、可吸入颗粒物生成等。通过跟踪离散颗粒的表面积这一内部变量来考虑该事件主导下的颗粒群动力学演变过程。