

# 外加液滴条件下固体细颗粒声凝并特性\*

赵豪<sup>1)</sup> 吴志豪<sup>1)</sup> 胡晓红<sup>1)</sup> 凡凤仙<sup>1)†</sup> 苏明旭<sup>1)2)</sup>

1) (上海理工大学能源与动力工程学院, 上海 200093)

2) (上海市动力工程多相流动与传热重点实验室, 上海 200093)

(2022年10月3日收到; 2023年1月11日收到修改稿)

外加声场激励下固体细颗粒的声凝并在燃烧污染物超低排放中具有应用潜力, 添加大粒径液滴有望提高细颗粒声凝并效果. 本文从颗粒运动、碰撞、凝并与反弹的动力学过程出发, 基于直接模拟蒙特卡罗方法, 建立气相中液滴与固体颗粒共存的气-液-固三相体系的声凝并模型, 对外加液滴条件下固体细颗粒声凝并的过程和效果开展数值模拟. 将模拟结果与实验相对比, 验证模型可靠性. 在此基础上, 探究外加液滴条件下细颗粒声凝并动力学行为, 考察外加液滴直径和数目浓度对细颗粒声凝并效果的影响规律. 结果表明, 外加液滴条件下, 固体细颗粒迅速与大粒径液滴凝并, 形成液-固混合相颗粒, 细颗粒凝并效率显著提升. 外加液滴直径和数目浓度是影响细颗粒声凝并的重要因素, 随着直径的增大或数目浓度的提高, 细颗粒凝并效率增大, 而增幅趋于减小. 研究结果可为复杂颗粒系统凝并模型的建立提供理论基础, 并可为燃烧源细颗粒超低排放提供方法指导.

**关键词:** 细颗粒, 声凝并, 外加液滴, 数值模拟**PACS:** 47.61.Jd, 47.35.Rs**DOI:** 10.7498/aps.72.20221912

## 1 引言

声凝并是指外加声场激励下颗粒发生相对运动和相互碰撞, 进而凝并在一起的现象. 在燃烧污染物超低排放的要求下, 细颗粒高效净化的需求与日俱增, 声凝并作为一种具有应用潜力的细颗粒排放控制预处理技术引起研究者的高度关注<sup>[1-5]</sup>. 然而, 已有声凝并相关研究普遍认为声场单独作用对亚微米细颗粒的凝并效率有限<sup>[6-8]</sup>, 为实现亚微米细颗粒的高效凝并, 一些学者提出了强化细颗粒声凝并的方法, 如添加液滴<sup>[8,9]</sup>、添加固体颗粒<sup>[10,11]</sup>, 以及多场协同作用<sup>[12,13]</sup>等. 其中, 添加液滴强化细颗粒声凝并具有操作简单、成本较低的优点, 并且液滴与固体细颗粒碰撞接触形成液桥, 产生的黏附力更强, 更有利于细颗粒凝并, 非常值得进行研究.

目前, 外加液滴增强细颗粒声凝并的研究较少, 且集中在实验方面. 虽然实验研究获得了外加液滴润湿性和黏性对声凝并效果的影响<sup>[9,8,14]</sup>, 但对外加液滴增强细颗粒声凝并的动力学行为缺乏关注. 已有数值模拟聚焦于外加液滴条件下声凝并的离散元模型和模型验证<sup>[15]</sup>, 受限于离散元方法计算量大而采用的模拟区域很小, 也难以全面揭示声凝并动力学行为. 此外, 目前缺少针对声凝并效果受外加液滴直径和浓度影响的系统研究. 外加液滴直径和浓度直接影响声尾流效应, 而正是外加液滴引发的强烈声尾流效应, 增强了颗粒间相互作用, 使得碰撞概率大幅提高<sup>[11]</sup>. 因此, 很有必要开展外加液滴条件下细颗粒声凝并动力学行为, 以及外加液滴直径和浓度对细颗粒声凝并效果影响的研究.

数值模拟具有参数设置灵活、研究成本低、结果展示直观的优势, 在声凝并研究中发挥着重要作

\* 国家自然科学基金 (批准号: 51976130) 和上海市科委科研计划 (批准号: 13DZ2260900) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: fanfengxian@usst.edu.cn

用. 多种数值模拟方法, 如区域算法<sup>[2,16]</sup>、直接模拟蒙特卡罗 (direct simulation Monte Carlo, DSMC) 方法<sup>[5,7]</sup>、离散单元法<sup>[15]</sup>被应用于声凝并研究. 其中, DSMC 方法采用取样颗粒代替数目庞大的真实颗粒, 追踪取样颗粒的运动轨迹, 通过概率判断碰撞的发生, 其既能够获得颗粒空间位置的演变信息, 又因计算颗粒数目少, 便于探讨较大区域内颗粒的凝并行为. 最近, 本课题组构建了一种适应性强的基于 DSMC 方法的固体颗粒声凝并模型<sup>[5]</sup>. 然而在外加液滴增强细颗粒声凝并的过程中, 不仅存在固体颗粒, 还存在液滴和液固混合相颗粒, 使得颗粒的相态和碰撞接触的黏附机制更为复杂, 迫切需要发展出适用于外加液滴条件下的声凝并模型.

本文针对气相中液滴与固体颗粒共存的气-液-固三相体系, 构建基于 DSMC 方法的声凝并模型, 并将其用于外加液滴增强细颗粒声凝并的研究. 在验证模型的基础上, 通过数值模拟探究外加液滴条件下细颗粒声凝并动力学行为, 考察外加液滴直径和数目浓度对细颗粒声凝并效果的影响规律. 本文研究可为复杂颗粒系统凝并模型的建立提供理论基础, 并可为燃烧源细颗粒超低排放提供方法指导.

## 2 数学模型与计算方法

解析水平平面行波声场激励下气相中液滴与固体颗粒组成的气-液-固三相体系声波对气相的影响、气相对颗粒的作用、颗粒运动和碰撞、颗粒凝并与反弹, 从颗粒动力学出发, 建立声凝并模型. 由于声波对颗粒的黏性夹带力 (曳力) 引起的同向相互作用是声凝并的基本机制, 将曳力在颗粒运动方程中进行考虑; 同时由于声凝并的声尾流效应与互辐射压力效应机制源于气相中的二次效应, 将二者纳入碰撞核函数进行考虑. 为便于建模, 设声波传播方向为  $x$  向, 重力方向为  $z$  向, 与  $x, z$  向垂直的方向为  $y$  向.

### 2.1 气相场方程

气相场受控于外加声场引起的气体介质波动速度  $u_g$ , 对于  $x$  向传播的平面行波声场, 波动方程为

$$u_g(x, t) = u_{\text{amp}} \sin(\omega t - kx), \quad (1)$$

式中,  $x$  为位置;  $t$  为时间;  $u_{\text{amp}}$  为气相速度振幅;  $\omega$  为角频率,  $\omega = 2\pi f$ ,  $f$  为频率;  $k$  为波数,  $k =$

$\omega/c$ ,  $c$  为声速.

气相速度振幅与声压级的函数关系为

$$u_{\text{amp}} = \frac{\sqrt{2}P_r}{c\rho_g} 10^{\frac{L}{20}}, \quad (2)$$

式中,  $P_r$  为参考声压,  $P_r = 2 \times 10^{-5}$  Pa;  $\rho_g$  为气相密度,  $L$  为声压级 (单位: dB).

### 2.2 颗粒运动方程

考虑曳力、重力和浮力, 颗粒  $i$  的运动方程可写为<sup>[17]</sup>

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = 3\pi \mu_g d_i (\mathbf{u}_g - \mathbf{v}_i) C_{li}/C_{ci} + \frac{1}{6}(\rho_i - \rho_g)\pi d_i^3 \mathbf{g}, \quad (3)$$

式中,  $m$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $d$ ,  $C_l$ ,  $C_c$ ,  $\rho$  分别为颗粒质量、速度、直径、惯性修正系数、肯宁汉滑移修正系数、密度;  $\mu_g$  为气相黏度;  $\mathbf{u}_g$  为气相速度矢量;  $\mathbf{g}$  为重力加速度; 下标  $i$  表示颗粒  $i$ .

$C_{li}$  和  $C_{ci}$  表达式分别为<sup>[18]</sup>

$$C_{li} = 1 + 0.15Re_i^{0.687}, \quad (4)$$

$$C_{ci} = 1 + Kn_i[1.257 + 0.400 \exp(-1.100/Kn_i)], \quad (5)$$

式中,  $Re_i$  和  $Kn_i$  分别为颗粒  $i$  的雷诺数和克努森数,  $Re_i = |\mathbf{u}_g - \mathbf{v}_i| d_i \rho_g / \mu_g$ ,  $Kn_i = 2\lambda_g / d_i$ ,  $\lambda_g$  为气相分子平均自由程.

### 2.3 颗粒碰撞模型

采用 DSMC 方法建立颗粒碰撞模型, 该方法立足于气体分子运动论, 基于取样颗粒的运动, 通过概率方法确定颗粒碰撞与否, 其能够有效节省计算时间与计算机内存, 适宜于描述包含大量颗粒的稀疏流动.

假设碰撞仅发生在同一网格内的颗粒之间, 在时间步长  $\Delta t_c$  内, 取样颗粒  $i$  与真实颗粒的碰撞概率可写为<sup>[5,19]</sup>

$$P_i = \sum_{j=1}^N P_{ij} = \sum_{j=1}^N \frac{\beta_{ij} w_j \Delta t_c}{V_c}, \quad (6)$$

式中,  $P$  为碰撞概率,  $N$  为颗粒  $i$  所在网格内的取样颗粒数目,  $\beta$  为碰撞核函数,  $w$  为数目权值 (取样颗粒所代表的真实颗粒数目),  $V_c$  为网格体积; 下标  $j$  表示颗粒  $j$ ,  $ij$  表示颗粒  $i$  与  $j$  之间.

碰撞核函数可写为<sup>[5]</sup>

$$\beta_{ij} = \beta_{ij}^{\text{OI}} + \beta_{ij}^{\text{GS}} + \beta_{ij}^{\text{AWE}} + \beta_{ij}^{\text{MRPE}} + \beta_{ij}^{\text{BD}}, \quad (7)$$

式中, 上标 OI, GS, AWE, MRPE, BD 分别表示同向相互作用、重力沉降作用、声尾流效应、互辐射压力效应、布朗扩散效应。

由于同向相互作用源于声场引起的气相振动对颗粒的黏性夹带, 重力沉降作用源于颗粒在重力、浮力和黏性阻力共同作用下的自由沉降, 这些作用已纳入颗粒运动方程, 因而同向相互作用和重力沉降作用碰撞核函数之和可通过颗粒的运动速度计算, 即:

$$\beta_{ij}^{\text{OI}} + \beta_{ij}^{\text{GS}} = \frac{\pi}{4} (d_i + d_j)^2 |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j|. \quad (8)$$

对于颗粒运动方程中未考虑的声尾流效应、互辐射压力效应、布朗扩散效应碰撞核函数可分别表示为

$$\beta_{ij}^{\text{AWE}} = \frac{3}{16} \frac{u_{\text{amp}}}{r} (d_i + d_j)^2 (d_i l_i + d_j l_j), \quad (9)$$

$$\beta_{ij}^{\text{MRPE}} = \frac{\sqrt{3} \rho_g u_{\text{amp}}^2}{144 \pi \mu_g} \frac{d_i^2 d_j^2}{d_i + d_j} (d_i F_{ij} + d_j F_{ji}), \quad (10)$$

$$\beta_{ij}^{\text{BD}} = \frac{2 k_B T}{3 \mu_g} (d_i + d_j) (C_{C_i}/d_i + C_{C_j}/d_j), \quad (11)$$

式中,  $r$  为颗粒  $i$  与颗粒  $j$  的中心距,  $l$  为滑移系数,  $F$  为相互作用函数,  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $T$  为温度.  $l$  和  $F$  的表达式详见文献 [20, 21].

采用修正的南布算法, 在  $P_{ij} < 1/N$  的前提下, 利用  $[0, 1)$  区间均匀分布的随机数  $R$ , 选择候选被碰撞颗粒  $j$  [19]:

$$j = \text{int}[RN] + 1, \quad (12)$$

式中,  $\text{int}$  表示取整数. 若  $R > j/N - P_{ij}$ , 则颗粒  $i$  与  $j$  发生碰撞.

## 2.4 颗粒碰撞后果的确定

颗粒碰撞后果 (凝并或反弹) 取决于颗粒间黏附力, 颗粒相态不同, 黏附力截然不同. 考虑到外加液滴直径普遍大于固体颗粒, 认为液固混合相颗粒形态由浸没机制决定, 即固相完全浸没在液相中. 图 1 给出了声凝并过程中碰撞颗粒对类型. 依据碰撞颗粒之间的黏附力, 针对碰撞后果提出以下简化假设: 1) 当颗粒对包含液滴时 (如图 1(b), (d), (e)), 将碰撞后果视为凝并; 2) 颗粒对由两个固体颗粒组成时 (如图 1(a)), 颗粒发生干碰撞, 碰撞后果由颗粒碰撞动能与颗粒间范德瓦耳斯力引起的黏附能决定; 3) 当颗粒对包含一个固体颗粒和一个混合相颗粒或包含两个混合相颗粒时 (如图 1(c) 和图 1(f)), 颗粒发生湿碰撞, 碰撞后果由颗粒碰撞动能与颗粒间液桥力引起的黏附能决定.

对于干碰撞, 基于碰撞过程中的能量平衡关系, 可以得到颗粒碰撞后发生凝并与反弹的临界速度 [22]:

$$v_{\text{cr}}^{\text{dry}} = \frac{A\sqrt{1-e^2}}{\pi d_{\text{min}} z_0^2 e^2 \sqrt{6 p_c \rho_{\text{min}} (1 + d_{\text{min}}/d_{\text{max}})}}, \quad (13)$$

式中,  $v_{\text{cr}}$  为临界碰撞速度,  $A$  为哈默克常数,  $e$  为恢复系数,  $z_0$  为最小接触距离,  $p_c$  为极限接触压力,  $\rho_{\text{min}}$  为较小颗粒的密度,  $d_{\text{min}}$  和  $d_{\text{max}}$  分别为较小和较大颗粒的直径, 上标  $\text{dry}$  表示干碰撞.

对于湿碰撞, 颗粒碰撞后发生凝并与反弹的临界速度为 [23]

$$v_{\text{cr}}^{\text{wet}} = \frac{9\mu_l (d_i + d_j)}{8\rho_s d_i d_j} \left(1 + \frac{1}{e}\right) \ln\left(\frac{\delta}{h_a}\right), \quad (14)$$

式中,  $\mu_l$  为液相黏度,  $\rho_s$  为固相密度,  $\delta$  为液膜厚度,  $h_a$  为颗粒表面粗糙度, 上标  $\text{wet}$  表示湿碰撞.

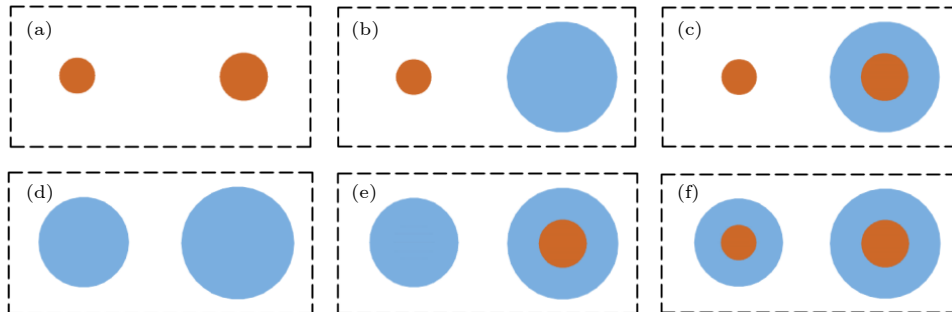


图 1 碰撞颗粒对类型 (a) 固体颗粒与固体颗粒; (b) 固体颗粒与液滴; (c) 固体颗粒与混合相颗粒; (d) 液滴与液滴; (e) 液滴与混合相颗粒; (f) 混合相颗粒与混合相颗粒

Fig. 1. Types of collision particle pair: (a) Solid particle and solid particle; (b) solid particle and droplet; (c) solid particle and mixed-phase particle; (d) droplet and droplet; (e) droplet and mixed-phase particle; (f) mixed-phase particle and mixed-phase particle.

当颗粒碰撞前的法向相对速度大于临界速度时, 颗粒反弹; 否则, 颗粒凝并.

## 2.5 颗粒碰撞后果的处理

基于取样颗粒所代表的真实颗粒发生的碰撞, 对碰撞后果进行处理. 例如, 取样颗粒  $i$  和  $j$  发生碰撞时, 真实碰撞颗粒对个数为  $\min(w_i, w_j)$ . 为保证稳定的计算精度, 保持取样颗粒数目不变, 通过调整取样颗粒参数反映真实颗粒凝并或反弹的结果.

### 2.5.1 颗粒凝并的处理

假设颗粒凝并过程中体积守恒, 同时应用质量守恒和动量守恒定律, 可得颗粒  $i$  和  $j$  碰撞后生成的凝并体的直径  $d_a$ 、密度  $\rho_a$ 、速度  $\mathbf{v}_a$  分别为

$$d_a = \sqrt[3]{d_i^3 + d_j^3}, \quad (15)$$

$$\rho_a = \frac{6(m_i + m_j)}{\pi(d_i^3 + d_j^3)}, \quad (16)$$

$$\mathbf{v}_a = \frac{m_i \mathbf{v}_i + m_j \mathbf{v}_j}{m_i + m_j}. \quad (17)$$

对于取样颗粒间碰撞, 通过调整数目权重、直径、密度和速度, 体现颗粒凝并的结果, 具体如下.

当  $w_i = w_j = 2n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) 时:

$$\begin{cases} w_i^{\text{new}} = w_i/2, & d_i^{\text{new}} = d_a, & \rho_i^{\text{new}} = \rho_a, & \mathbf{v}_i^{\text{new}} = \mathbf{v}_a, \\ w_j^{\text{new}} = w_j/2, & d_j^{\text{new}} = d_a, & \rho_j^{\text{new}} = \rho_a, & \mathbf{v}_j^{\text{new}} = \mathbf{v}_a. \end{cases} \quad (18)$$

当  $w_i = w_j = 2n - 1$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) 时:

$$\begin{cases} w_i^{\text{new}} = (w_i + 1)/2, & d_i^{\text{new}} = d_a, & \rho_i^{\text{new}} = \rho_a, & \mathbf{v}_i^{\text{new}} = \mathbf{v}_a, \\ w_j^{\text{new}} = (w_j - 1)/2, & d_j^{\text{new}} = d_a, & \rho_j^{\text{new}} = \rho_a, & \mathbf{v}_j^{\text{new}} = \mathbf{v}_a. \end{cases} \quad (19)$$

当  $w_i > w_j$  时:

$$\begin{cases} w_i^{\text{new}} = w_i - w_j, & d_i^{\text{new}} = d_i, & \rho_i^{\text{new}} = \rho_i, & \mathbf{v}_i^{\text{new}} = \mathbf{v}_i, \\ w_j^{\text{new}} = w_j, & d_j^{\text{new}} = d_a, & \rho_j^{\text{new}} = \rho_a, & \mathbf{v}_j^{\text{new}} = \mathbf{v}_a. \end{cases} \quad (20)$$

当  $w_i < w_j$  时:

$$\begin{cases} w_i^{\text{new}} = w_i, & d_i^{\text{new}} = d_a, & \rho_i^{\text{new}} = \rho_a, & \mathbf{v}_i^{\text{new}} = \mathbf{v}_a, \\ w_j^{\text{new}} = w_j - w_i, & d_j^{\text{new}} = d_j, & \rho_j^{\text{new}} = \rho_j, & \mathbf{v}_j^{\text{new}} = \mathbf{v}_j. \end{cases} \quad (21)$$

式中, 上标 new 表示凝并后的新值.

### 2.5.2 颗粒反弹的处理

基于硬球模型, 颗粒  $i$  和  $j$  发生干碰撞后的反弹速度如下<sup>[17]</sup>.

当  $\frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{G}}{|\mathbf{G}_t|} \leq \frac{2}{7} \frac{1}{f_p(1+e)}$  时:

$$\begin{cases} \mathbf{v}_i^r = \mathbf{v}_i - (\mathbf{n} + f_p \mathbf{t})(\mathbf{n} \cdot \mathbf{G})(1+e) \frac{m_j}{m_i + m_j}, \\ \mathbf{v}_j^r = \mathbf{v}_j + (\mathbf{n} + f_p \mathbf{t})(\mathbf{n} \cdot \mathbf{G})(1+e) \frac{m_i}{m_i + m_j}. \end{cases} \quad (22)$$

当  $\frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{G}}{|\mathbf{G}_t|} > \frac{2}{7} \frac{1}{f_p(1+e)}$  时:

$$\begin{cases} \mathbf{v}_i^r = \mathbf{v}_i - [(1+e)(\mathbf{n} \cdot \mathbf{G})\mathbf{n} + \frac{2}{7}|\mathbf{G}_t|\mathbf{t}] \frac{m_j}{m_i + m_j}, \\ \mathbf{v}_j^r = \mathbf{v}_j + [(1+e)(\mathbf{n} \cdot \mathbf{G})\mathbf{n} + \frac{2}{7}|\mathbf{G}_t|\mathbf{t}] \frac{m_i}{m_i + m_j}. \end{cases} \quad (23)$$

这里,  $f_p$  为摩擦系数;  $\mathbf{G}$  为相对速度,  $\mathbf{G} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ ,  $\mathbf{G}_t$  为相对速度  $\mathbf{G}$  的切向分量;  $\mathbf{t}$  为切向单位向量; 上标 r 表示反弹后.

对于颗粒  $i$  和  $j$  的湿碰撞, 采用湿恢复系数代替 (22) 式和 (23) 式中的恢复系数, 以获得反弹速度. 湿恢复系数  $e^{\text{wet}}$  可写为<sup>[23]</sup>

$$e^{\text{wet}} = e - \frac{9\mu_1(d_i + d_j)(1+e)\ln(\delta/h_a)}{8\rho_s d_i d_j |\mathbf{G} \cdot \mathbf{n}|}. \quad (24)$$

对于取样颗粒间碰撞后反弹的处理方法为: 当  $w_i = w_j$  时, 按照 (22) 式和 (23) 式更新颗粒速度即能体现真实颗粒碰撞后发生反弹的结果; 当  $w_i \neq w_j$  时, 为保持取样颗粒数目不变, 采用“分离-合并”方法处理<sup>[24]</sup>. 例如, 在  $w_i > w_j$  时, 首先将取样颗粒  $i$  分离为数目权重分别为  $w_j$  和  $(w_i - w_j)$  的取样颗粒  $i^*$  和  $i^{**}$ , 并处理等权重取样颗粒  $i^*$  和  $j$  的反弹; 然后, 将取样颗粒  $i^*$  和未参与碰撞的取样颗粒  $i^{**}$  合并恢复为取样颗粒  $i$ . 根据动量守恒定律, 合并后取样颗粒  $i$  的速度为

$$\mathbf{v}_i^m = [w_j \mathbf{v}_{i^*}^r + (w_i - w_j) \mathbf{v}_{i^{**}}^0] / w_i, \quad (25)$$

式中, 上标 m 表示合并后, 下标  $i^*$  和  $i^{**}$  分别表示样颗粒  $i^*$  和  $i^{**}$ .

基于上述处理方法, 颗粒反弹的结果如下.

当  $w_i = w_j$  时:

$$\mathbf{v}_i^{\text{new}} = \mathbf{v}_i^r, \quad \mathbf{v}_j^{\text{new}} = \mathbf{v}_j^r. \quad (26)$$

当  $w_i > w_j$  时:

$$\mathbf{v}_i^{\text{new}} = \mathbf{v}_i^m, \quad \mathbf{v}_j^{\text{new}} = \mathbf{v}_j^r. \quad (27)$$

当  $w_i < w_j$  时:

$$\mathbf{v}_i^{\text{new}} = \mathbf{v}_i^r, \quad \mathbf{v}_j^{\text{new}} = \mathbf{v}_j^m. \quad (28)$$

需要说明的是采用“分离-合并”方法时将不可避免地产生能量损失  $\Delta E$ :

$$\Delta E = \frac{1}{2} m_i \left[ w_j |\mathbf{v}_i^r|^2 + (w_i - w_j) |\mathbf{v}_i^{0**}|^2 \right] - \frac{1}{2} m_i w_i |\mathbf{v}_i^m|^2. \quad (29)$$

为保持系统的能量稳定, 需要将该能量损失补偿到后续碰撞颗粒  $s$  上, 该颗粒应满足 [5]:

$$\frac{1}{2} < \frac{w_s m_s}{w_i m_i} < 2, \quad (30)$$

式中, 下标  $s$  表示颗粒  $s$ .

## 2.6 数值计算方法

选择  $0 \leq x \leq \lambda, 0 \leq y \leq 0.01 \text{ m}, 0 \leq z \leq 0.01 \text{ m}$  的区域为模拟区域, 按照文献 [5] 中的方法产生异权重初始取样颗粒, 将取样颗粒均匀随机地加入模拟区域, 并施加循环边界条件. 鉴于气相速度随时间的演变已由气相场方程给出, 因而无需通过数值方法求解气相场; 而对于颗粒运动和碰撞, 则需要将方程离散到合适的时间步长上进行求解. 时间步长的选择直接影响到计算精度和计算代价, 对于数值模拟非常重要. 一般来说, 求解颗粒运动的时间步长  $\Delta t$  应小于颗粒松弛时间; 求解颗粒碰撞的时间步长  $\Delta t_c$  应远小于颗粒平均自由时间 [17],

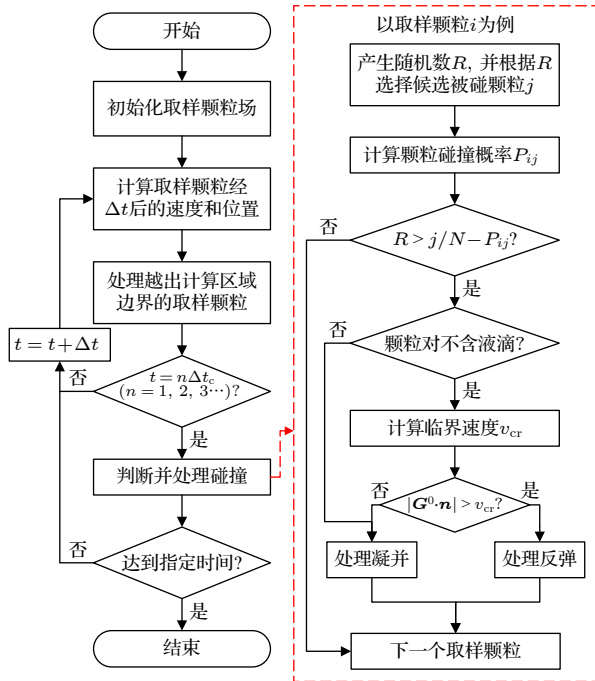


图 2 数值模拟流程

Fig. 2. Flow chart of numerical simulation.

同时应满足对于任意取样颗粒  $i$  的碰撞概率  $P_i < 1$ . 基于上述要求, 本文采用  $\Delta t = 10^{-7} \text{ s}, \Delta t_c = 10^{-5} \text{ s}$ , 此时,  $\Delta t_c / \Delta t = 100$ , 表示颗粒运动每计算 100 步, 求解 1 步颗粒碰撞. 具体数值模拟流程见图 2.

## 3 结果与讨论

### 3.1 模型验证

采用与 Zhang 等 [15] 实验一致的气相参数、声场条件、初始颗粒 (固体颗粒为燃煤飞灰颗粒, 外加液滴为雾化水滴) 特性参数, 针对声场单独作用下固体颗粒的声凝并, 以及外加液滴条件下固体颗粒的声凝并两种工况开展数值模拟, 以验证模型. 本节的数值模拟参数见表 1, 其中,  $P$  为气相静压,  $\rho_l$  为液相密度, 恢复系数  $e$  与摩擦系数  $f_p$  的取值依据燃煤飞灰颗粒的参数确定 [25].

图 3 给出了数值模拟得到的声凝并后颗粒粒径分布与实验结果的对比, 图中  $C_N$  为颗粒数目浓度. 图 3 同时示出了初始固体颗粒与外加液滴的粒径分布, 可见, 固体颗粒初始粒径为  $0.02\text{--}10 \mu\text{m}$ , 液滴粒径为  $7.8\text{--}53 \mu\text{m}$ , 索特尔平均径  $\text{SMD} = 26.58 \mu\text{m}$ . 数值模拟中, 声场单独作用条件下取样颗粒数目为 7448 个; 外加液滴条件下, 除 7448 个固体取样颗粒外, 还有 272 个液体取样颗粒. 模拟结果表明, 与声场单独作用相比, 外加液滴条件下声凝并后颗粒数目浓度进一步下降, 这表明添加液滴能够增强声凝并效果, 与实验表现出相同的定性规律. 由于外加液滴粒径较大, 难以被声波夹带, 从而声场对其运动影响很弱, 其与气相间滑移速度大, 引起显著的声尾流效应, 使得声凝并效果明显增强. 对模拟结果和实验数据进行定量对比发现, 声场单独作用下模拟与实验取得良好一致; 而外加液滴条件下二者的吻合度有所降低, 模拟得到的声凝并效果略优于实验. 究其原因可能是实验中液滴通过雾化喷嘴添加, 难以使液滴分布均匀, 使得声场中存在无液滴区域, 从而导致总体声凝并效果弱于模拟结果. 此外, 建模时认为混合相颗粒形态由浸没机制决定, 实际上声凝并中混合相颗粒的固相体积有可能大于液相体积, 使得其形态由分散机制

表 1 模型验证采用的参数

Table 1. Parameters used for model validation.

	$P/\text{Pa}$	$T/\text{K}$	$L/\text{dB}$	$f/\text{Hz}$	$t/\text{s}$	$\rho_s/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	$\rho_l/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	$e$	$f_p$
数值	101325	298.15	144	1400	4	2500	1000	0.6	0.2

决定, 而基于分散机制的混合相颗粒与固体颗粒之间的黏附力弱于基于浸没机制的混合相颗粒, 这也将一定程度上引起数值模拟预测的声凝并效果更好. 综上所述, 本文所建立的模型能够合理预测颗粒声凝并过程. 需要说明的是, 尽管实际颗粒往往带有一定的电荷 (正电荷或负电荷), 但静电力与曳力相比很小, 使得颗粒运动几乎不受静电力的影响. 对于颗粒碰撞而言, 静电力通过影响颗粒间黏附能而影响颗粒凝并与分离的临界速度, 从而可能对碰撞后果产生影响, 在今后的研究中, 可考虑静电力的影响, 对模型进一步改进.

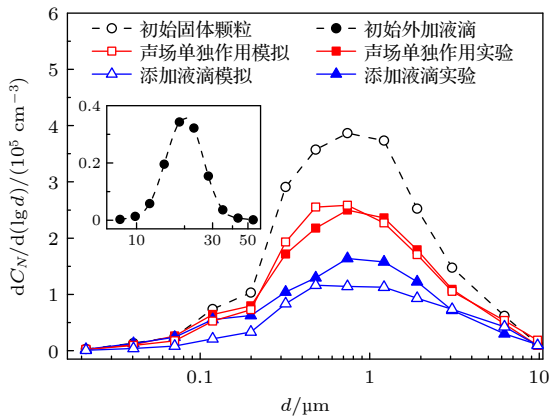


图 3 声凝并后粒径分布模拟结果与文献 [15] 实验的对比  
Fig. 3. Comparison of simulation results of particle size distribution after acoustic agglomeration with experiments from literature [15].

### 3.2 外加液滴条件下声凝并动力学行为

受实验中颗粒来源 (除尘器收集的飞灰) 的限制, 3.1 节中采用的固体颗粒直径偏大, 而声凝并的应用场合针对的是未被除尘器捕集的细颗粒, 因此, 以下研究采用几何平均直径  $d_g = 0.2 \mu\text{m}$ 、几何标准偏差  $\sigma_g = 2$  的服从对数正态分布的固体细颗粒, 总数目浓度  $C_{\text{tot}}$  取  $5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ , 此时, 99.9% 以上的颗粒在  $0.03\text{--}3 \mu\text{m}$ . 数值模拟采用的气相参数、声场条件、颗粒特性参数见表 2, 取样颗粒数目为 8403 个, 其中固体颗粒 8243 个, 液滴 160 个.

图 4 给出了外加液滴条件下细颗粒声凝并动力学行为. 由图 4(a) 中粒径分布随时间演变的结果可知, 最后一级细颗粒数目浓度略微上升, 这是由

于细颗粒之间发生凝并产生新颗粒引起的; 其余各级细颗粒数目浓度明显下降, 颗粒数目浓度峰值降低尤为显著, 这是由于细颗粒之间凝并以及细颗粒与外加液滴之间凝并共同作用的结果. 由图 4(b) 中细颗粒凝并效率 (细颗粒数目浓度减小量占初始细颗粒数目浓度的百分比) 可知, 随着时间的延长, 凝并效率增大, 但增速降低. 其原因是起初颗粒数目浓度高, 颗粒间相互作用强, 颗粒碰撞与凝并概率大; 然而由于声凝并的进行, 颗粒数目浓度降低, 颗粒间相互作用减弱, 使得颗粒凝并效率增速下降. 为了清晰展示颗粒凝并过程, 图 4(c) 中对固相采用灰色着色, 并对固相和液相采用不同的比例进行放大. 由图 4(c) 可见, 声凝并过程中出现了大粒径的混合相颗粒, 特别是停留时间达到 2 s 时, 已不存在未与细颗粒发生凝并的液滴, 表明细颗粒与外加液滴的凝并是一个迅速的过程, 这与大粒径液滴对细颗粒产生的强烈声尾流效应密切相关 [11].

### 3.3 外加液滴直径对声凝并效果的影响

图 5 给出了外加液滴直径对声凝并效果的影响. 数值模拟中, 声场单独作用条件下取样颗粒数目为 8243 个; 外加液滴条件下取样颗粒数目为 8403 个, 含 8243 个固体颗粒, 160 个液滴. 由图 5(a) 可知, 与声场单独作用相比, 液滴直径为  $10 \mu\text{m}$  时声凝并后细颗粒粒径分布变化很小, 而液滴直径达到  $20 \mu\text{m}$  后细颗粒数目浓度明显下降, 并且随着液滴直径的增大, 细颗粒数目浓度下降更为显著. 一方面, 外加液滴直径增大, 声尾流效应增强, 引起碰撞概率增大, 促进了声凝并的进行; 另一方面, 外加液滴直径增大, 引起其与细颗粒之间的有效碰撞体积增大, 也有利于颗粒的碰撞与凝并. 图 5(b) 中外加液滴直径为 0 对应于声场单独作用的情况. 由图 5(b) 可以看出: 随着外加液滴直径的增大, 细颗粒凝并效率上升; 当液滴直径为  $10\text{--}30 \mu\text{m}$  时, 颗粒凝并效率增幅最大, 而液滴直径大于  $30 \mu\text{m}$  后, 增幅有所降低. 凝并效率增幅降低的原因可解释为: 外加液滴直径增大, 颗粒凝并效果增强, 引起颗粒平均间距增大、颗粒间相互作用减弱, 抑制了颗粒碰撞概率的提高, 从而凝并效率增幅降低.

表 2 数值模拟参数

Table 2. Parameters used in numerical simulation.

	$P/\text{Pa}$	$T/\text{K}$	$L/\text{dB}$	$f/\text{Hz}$	$t/\text{s}$	$\rho_s/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	$\rho_l/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	$e$	$f_p$
数值	101325	298.15	140	2000	4	2500	1000	0.6	0.2

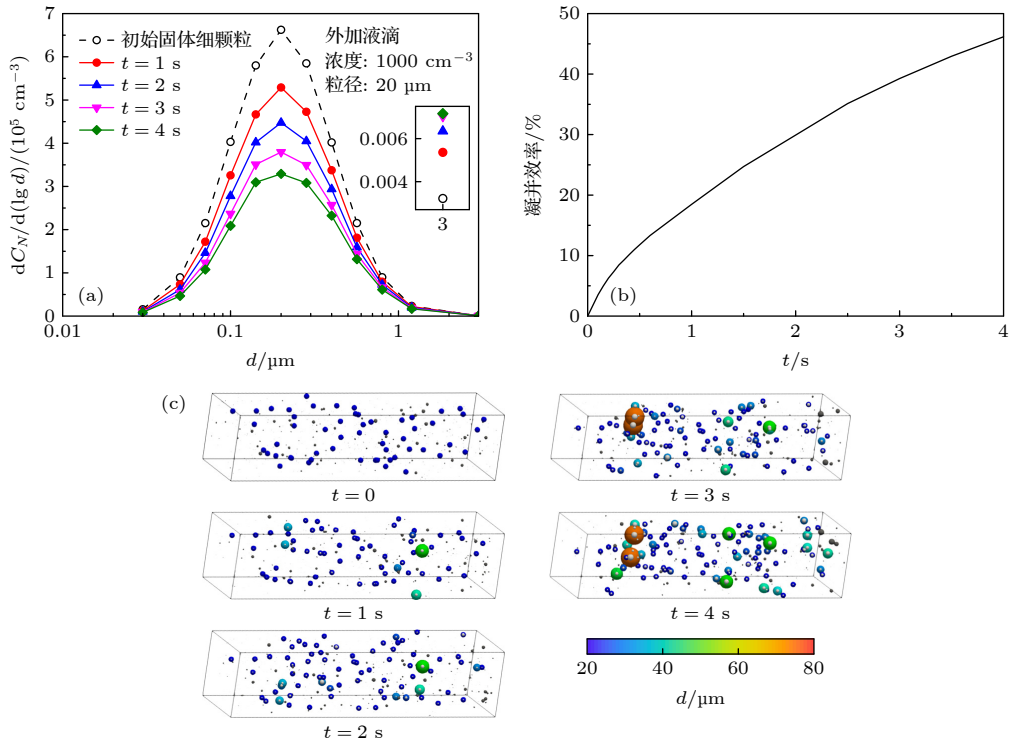


图 4 声凝并动力学行为 (a) 粒径分布; (b) 细颗粒凝并效率; (c) 凝并过程快照 ( $0 \leq x \leq 0.25\lambda$ , 液相放大 40 倍, 固相放大 120 倍)

Fig. 4. Dynamic behavior of acoustic agglomeration: (a) Particle size distribution; (b) agglomeration efficiency of fine particles; (c) snapshots of agglomeration process ( $0 \leq x \leq 0.25\lambda$ , liquid phase at 40× magnification and solid phase at 120× magnification).

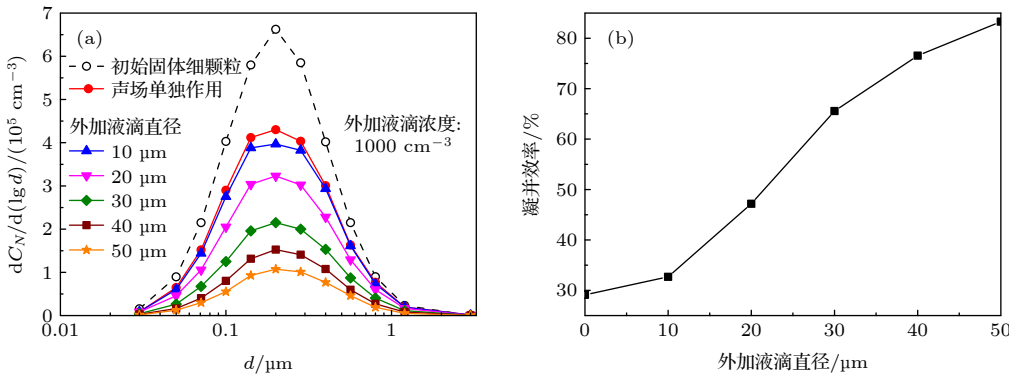


图 5 外加液滴直径对声凝并效果的影响 (a) 粒径分布; (b) 细颗粒凝并效率

Fig. 5. Influence of additional droplet diameter on performance of acoustic agglomeration: (a) Particle size distribution; (b) agglomeration efficiency of fine particles.

### 3.4 外加液滴数目浓度对声凝并效果的影响

图 6 给出了外加液滴数目浓度对声凝并效果的影响. 数值模拟中采用的取样颗粒数目与 3.3 节一致. 由图 6(a) 可知, 与声场单独作用相比, 外加液滴数目浓度为  $100 \text{ cm}^{-3}$  时声凝并后细颗粒粒径分布变化微小, 外加液滴数目浓度为  $500 \text{ cm}^{-3}$  时声凝并后细颗粒数目浓度下降明显; 外加液滴条件下, 声凝并后细颗粒数目浓度随液滴数目浓度的增

大而单调下降. 由图 6(b) 可以看出, 颗粒凝并效率随液滴数目浓度单调上升, 但上升速率迅速减小; 特别是当外加液滴浓度达到  $3000 \text{ cm}^{-3}$  时, 继续提高液滴浓度对细颗粒凝并效率的影响很小. 究其原因: 外加液滴数目浓度较高时, 颗粒间相互作用较强, 颗粒凝并效率较高; 然而由于声凝并的快速进行, 颗粒数目浓度迅速降低, 颗粒间距增大, 抑制了颗粒碰撞概率的增大, 使得凝并效率的上升幅度减小.

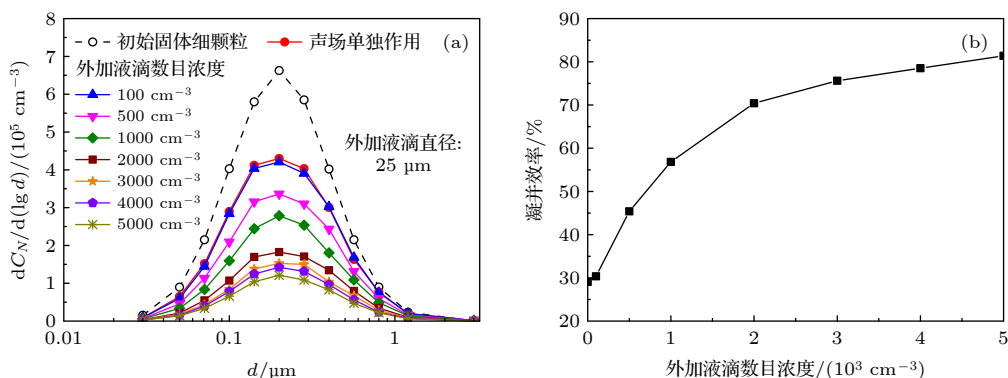


图 6 外加液滴数目浓度对声凝并效果的影响 (a) 粒径分布; (b) 细颗粒凝并效率

Fig. 6. Influence of additional droplet number concentration on performance of acoustic agglomeration: (a) Particle size distribution; (b) agglomeration efficiency of fine particles.

## 4 结 论

从颗粒动力学出发, 基于 DSMC 方法建立了气相中液滴与固体颗粒共存的气-液-固三相体系的声凝并模型, 利用该模型开展外加液滴增强固体细颗粒声凝并的数值模拟研究, 将模拟结果与实验相对比, 验证模型可靠性; 在此基础上, 研究外加液滴条件下声凝并动力学行为, 获得外加液滴直径、数目浓度对声凝并效果的影响规律, 得到如下结论:

1) 外加液滴条件下, 随着声场作用时间的延长, 颗粒数目浓度峰值显著降低, 颗粒凝并效率增大; 外加液滴与固体细颗粒凝并过程迅速, 声场作用 2 s 时, 颗粒系中已不存在纯液滴。

2) 与声场单独作用相比, 外加液滴直径达到 20 μm 以上时声凝并后细颗粒数目浓度明显下降; 随着外加液滴直径的增大, 颗粒凝并效率增大, 但当外加液滴直径达到 30 μm 以上时, 增幅降低。

3) 外加液滴数目浓度在 500 cm<sup>-3</sup> 以上时, 能有效增强细颗粒声凝并; 细颗粒凝并效率随液滴数目浓度的增大而单调上升, 但上升率迅速减小, 当外加液滴浓度达到 3000 cm<sup>-3</sup> 时, 继续提高液滴浓度对凝并效率的影响很小。

## 参考文献

[1] Zhou D, Luo Z, Jiang J, Chen H, Lu M, Fang M 2016 *Powder Technol.* **289** 52  
 [2] Shang X P, Ng B F, Wan M P, Xiong J W, Arikrisnan S 2018 *Aerosol Sci. Technol.* **52** 872  
 [3] Zhang G X, Ma Z F, Shen J, Zhang K, Wang J Q, Chi Z H 2020 *J. Hazard. Mater.* **382** 121089

[4] Qu G N, Fan F X, Zhang S H, Su M X 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 064704 (in Chinese) [屈广宁, 凡凤仙, 张斯宏, 苏明旭 2020 *物理学报* **69** 064704]  
 [5] Wu Z H, Fan F X, Yan J P, Chen H T, Hu X H, Su M X 2022 *Chem. Eng. Sci.* **249** 117298  
 [6] Liu J Z, Zhang G X, Zhou J H, Zhao W D, Cen K F 2009 *Powder Technol.* **193** 20  
 [7] Fan F X, Zhang M J, Peng Z B, Chen J, Su M X, Moghtaderi B, Doroodchi E 2017 *Aerosol Air Qual. Res.* **17** 1073  
 [8] Yan J P, Chen L Q, Li Z 2016 *Fuel.* **165** 316  
 [9] Zhang G X, Zhang L L, Wang J, Hu E 2017 *Powder Technol.* **317** 181  
 [10] Wang J, Liu J Z, Zhang G X, Zhou J H, Cen K F 2011 *Powder Technol.* **210** 315  
 [11] Yang N N, Fan F X, Hu X H, Su M X 2022 *J. Aerosol Sci.* **165** 106018  
 [12] Yan J P, Chen L Q, Lin Q 2017 *Powder Technol.* **315** 106  
 [13] Chen H, Wang T, Luo Z Y, Zhou D, Lu M S, He M C, Fang M X, Cen K F 2017 *Aerosol Air Qual. Res.* **17** 857  
 [14] Yan J P, Lin Q, Zhao S H, Chen L Q 2018 *Powder Technol.* **340** 8  
 [15] Zhang G X, Wang J Q, Chi Z H, Hu E 2018 *Chem. Eng. Sci.* **187** 342  
 [16] Shang X P, Wan M P, Ng B F, Ding S R 2020 *Powder Technol.* **362** 111  
 [17] Crowe C T, Schwarzkopf J D, Scommerfeld M, Tsuij Y 2012 *Multiphase Flows with Droplets and Particles* (2nd Ed.) (New York: CRC Press) pp119–137  
 [18] Higashitani K, Makino H, Matsusaka S 2020 *Powder Technology Handbook* (4th Ed.) (New York: CRC Press) p60  
 [19] Tsuji Y, Tanaka T, Yonemura S 1998 *Powder Technol.* **95** 254  
 [20] Zhang G X, Liu J Z, Wang J, Zhou J H, Cen K F 2012 *Chin. Sci. Bull.* **57** 2404  
 [21] Song L 1990 *Ph. D. Dissertation* (State College: Pennsylvania State University)  
 [22] Sgrott O L, Sommerfeld M 2019 *Can. J. Chem. Eng.* **97** 511  
 [23] Ennis B J 1991 *Powder Technol.* **65** 257  
 [24] He Y X, Zhao H B 2016 *Int. J. Multiphase Flow.* **83** 12  
 [25] Kleinhans U, Wieland C, Frandsen F J, Spliethoff H 2018 *Prog. Energy Combust. Sci.* **68** 65

# Acoustic agglomeration characteristics of fine solid particles under effect of additional droplets\*

Zhao Hao<sup>1)</sup> Wu Zhi-Hao<sup>1)</sup> Hu Xiao-Hong<sup>1)</sup>  
Fan Feng-Xian<sup>1)2)†</sup> Su Ming-Xu<sup>1)2)</sup>

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, Shanghai 200093, China*)

(Received 3 October 2022; revised manuscript received 11 January 2023)

## Abstract

Agglomeration of fine solid particles under the excitation of external acoustic field has potential applications in the field of ultra-low emission of combustion pollutants. It is expected that the performance of particle agglomeration can be improved by adding large sized liquid droplets. According to the dynamic process of acoustic agglomeration, including the particle motion, collision, agglomeration and rebound, a model of acoustic agglomeration for gas-liquid-solid three phase system with coexistence of liquid droplets and solid particles in gas phase is developed by using the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method. Using this model, numerical simulations are performed to investigate the process and performance of acoustic agglomeration of fine solid particles under the effect of additional droplets. The numerical results are compared with experimental data, and the proposed model is validated. On this basis, the dynamic behaviors of acoustic agglomeration of fine particles in the case with additional droplets are explored. Furthermore, the influences of the diameter and number concentration of additional droplets on the performance of acoustic agglomeration of fine particles are examined. The results show that rapid agglomeration among the solid fine particles and additional droplets can be achieved by adding droplets into the acoustic field, yielding large sized liquid-solid mixed-phase particles. In this process, the agglomeration efficiency of fine particles increases significantly. It is also found that the diameter and number concentration of additional droplets are important factors that affect the acoustic agglomeration of fine particles. The agglomeration efficiency of fine particles rises, while the magnitude of increase tends to decrease with the droplet diameter and number concentration increasing. The research results can provide both theoretical basis for modeling the agglomeration process of complex particle systems and method guidance for achieving the ultra-low emission of fine particles from combustion sources.

**Keywords:** fine particles, acoustic agglomeration, additional droplets, numerical simulation

**PACS:** 47.61.Jd, 47.35.Rs

**DOI:** 10.7498/aps.72.20221912

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51976130) and the Science and Technology Commission of Shanghai Municipality, China (Grant No. 13DZ2260900).

† Corresponding author. E-mail: fanfengxian@usst.edu.cn



## 外加液滴条件下固体细颗粒声凝并特性

赵豪 吴志豪 胡晓红 凡凤仙 苏明旭

### Acoustic agglomeration characteristics of fine solid particles under effect of additional droplets

Zhao Hao Wu Zhi-Hao Hu Xiao-Hong Fan Feng-Xian Su Ming-Xu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 064702 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20221912

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221912>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 驻波声场中单分散细颗粒的相互作用特性

Interaction between monodisperse fine particles in a standing wave acoustic field

物理学报. 2020, 69(6): 064704 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191681>

#### 疏水表面振动液滴模态演化与流场结构的数值模拟

Numerical simulation of modal evolution and flow field structure of vibrating droplets on hydrophobic surface

物理学报. 2021, 70(14): 144701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210161>

#### 油滴撞击油膜层内气泡的变形与破裂过程的数值模拟

Numerical simulation of deformation and rupture process of bubble in an oil film impacted by an oil droplet

物理学报. 2018, 67(11): 114701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180133>

#### 小液滴撞击壁面传热特性数值分析

Numerical analysis of heat transfer characteristics of small droplets impacting on wall

物理学报. 2021, 70(7): 074402 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201354>

#### 物性参数对液滴的聚并自弹跳的影响及其关联分析

Effect and relational analysis of physical parameters on coalescence-induced self-propelled jumping of droplets

物理学报. 2021, 70(12): 124702 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201714>

#### 化学复合率对激发赤道等离子体泡影响的数值模拟

Numerical simulation of recombination rate effect on development of equatorial plasma bubbles

物理学报. 2019, 68(19): 199401 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190173>