# 气溶胶“沉降—扩散”联合动态数值模拟

孙杜娟,胡以华,李 乐

(1. 脉冲功率激光技术国家重点实验室(电子工程学院),安徽 合肥 230037;
2. 电子制约技术安徽省重点实验室,安徽 合肥 230037)

**摘 要:** 近年来,气溶胶作为一种无源干扰手段,以其较好经济性和较高的实用性得到了各国军方的重视并在现代高科技下的局部战争中得到广泛应用。基于牛顿第二定律建立了气溶胶粒子的运动方程,采用有限差分方法对粒子运动方程和气溶胶平流扩散方程进行差分运算,构建了重力作用下的气溶胶“沉降—扩散”联合动态模型,基于模型提出了气溶胶“沉降—扩散”联合动态数值模拟方法。以某自主开发的气溶胶材料为实验样品,模拟烟幕箱中气溶胶的“沉降—扩散”联合动态运动,研究气溶胶浓度的时域分布,并与烟幕箱采样实验结果进行比较。实验结果表明:气溶胶“沉降—扩散”联合动态模型能够较好地模拟气溶胶的动态特征, 对研究气溶胶材料和发烟器性能、开展气溶胶干扰动态仿真实验、评估气溶胶干扰效能等具有重要意义。

**关键词:** 气溶胶; “沉降—扩散”联合动态模型; 有限差分方法; 数值模拟

**中图分类号:** V211.3 **文献标志码:** A **文章编号:** 1007-2276(2014)02-0449-05

# Numerical simulation of aerosol sedimentation and diffusion

Sun Dujuan, Hu Yihua, Li Le

(1. State Key Laboratory of Pulsed Power Laser Technology (Electronic Engineering Institute), Hefei 230037, China;
2. Anhui Province Key Laboratory of Electronic Restriction, Hefei 230037, China)

**Abstract:** In recent, aerosol which is a passive jamming method has been taken seriously by the military and has been widely used in the modern super-science local war because of its obvious economic benefits and great practicability. The aerosol particles′ motion equation was presented in this paper. By using the finite-difference method, the motion equation and a mathematical model of aerosol sedimentation and diffusion were given in difference expressions, and a dynamic model of aerosol sedimentation and diffusion was formulated. Method of numerical simulation of aerosol dynamic sedimentation and diffusion was presented. The consistence of the simulation experiment′s result and smoke chamber experiments show that the model presented in this paper can accurately simulate the motion of aerosol, which is significant in the research of aerosol material and aerosol behavior, the dynamic simulation experiment of aerosol jamming and the performance evaluation of aerosol jamming.

**Key words:** aerosol; "sedimentation & diffusion" dynamic model; finite-difference method; numerical simulation

**收稿日期:** 2013-07-10; **修订日期:** 2013-08-25

**基金项目:** 国家自然科学基金(61271353)

**作者简介:** 孙杜娟(1984-),女,博士生,主要研究方向为光电信息处理。Email:sunnydujuan@yeah.net

**导师简介:** 胡以华(1962-),男,教授,主要研究方向为空间信息和光电信息处理。Email:skl_hyh@163.com

## 0 引 言

在大气平流、湍流、地球引力以及随机力作用下，气溶胶的位置、浓度、尺寸等随着时间推移发生不断变化，表现为整个“云团”的沉降与扩散。研究气溶胶的沉降与扩散运动规律对开展气溶胶使用及效能评估研究具有重要意义。目前，国内外针对这一领域的研究主要集中在以下两个方面[1-9]：(1) 单个气溶胶粒子的沉降运动规律。利用 Stokes 沉降定律和修正后模型研究不同形状粒子在无大气平流和湍流作用下的自由沉降规律。(2) 整个气溶胶的扩散运动规律。在一定的大气平流或湍流条件下，利用解析法或数值法研究气溶胶的扩散运动规律。在上述研究中，气溶胶粒子的沉降与扩散运动往往被分开单独考察。例如，在进行材料研究中，大气被认为是静止的分散介质，气溶胶的扩散现象被忽略，仅仅考察气溶胶在重力和空气粘滞力作用下的沉降；在进行气溶胶使用及效能评估研究时，气溶胶粒子的沉降运动则被忽略，而仅仅考察气溶胶在大气平流与扩散作用下的扩散对气溶胶浓度、尺寸以及持续时间的影响[8-9]。上述方法虽然已经被广泛采用，但是对实验数据和现象的准确解析产生影响。针对上述问题，文中构建了气溶胶“沉降——扩散”联合动态模型构建，并基于模型提出了气溶胶“沉降——扩散”联合动态数值模拟方法，研究气溶胶的整体运动规律。

## 1 气溶胶“沉降——扩散”联合动态模型与数值模拟方法

### 1.1 气溶胶粒子差分运动方程

设定 $z$ 轴的反方向垂直指向地面。在该垂直方向上，粒子的运动受重力、浮力、粘滞力以及随机作用力的影响。根据牛顿第二定律，球形气溶胶粒子在 $z$ 轴上的运动分量 $w$ 随时间的变化方程为：

$$\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}t}=\frac{G-F_f-F_{r,z}+F_{s,z}}{m} \tag{1}$$

式中：$G$ 为粒子重力，$G=mg$；$m$ 为粒子的质量，$m=(4/3)\pi r^3\rho$，$\rho$ 为粒子母体密度，$r$ 为粒子半径；$F_f$ 为空气对粒子的浮力，$F_f=(4/3)\pi r^3\rho_{\mathrm{air}}g$；$F_{r,z}$ 表示沿 $z$ 轴方向上空气对粒子的粘滞力，$F_{r,z}=6\pi\eta rw$，$\rho_{\mathrm{air}}$ 为空气的密度，$\eta$ 为空气粘滞系数；$F_{s,z}$ 为粒子在垂直方向上受到的随机作用力，$\overline{Fs,z(t)}=0$[8-11]。

对公式(1)中的时间差分采用前向差分格式，得到：

$$w_{i,j,k}^{n+1}=\left(\frac{G-F-F_{r,i,j,k,z}^{n}+F_{s,i,j,k,z}^{n}}{m}\right)\times\Delta t+w_{i,j,k}^{n} \tag{2}$$

式中：$w_{i,j,k}^{n}$ 表示时刻，$t=n\Delta t$ 粒子在点 $((i-1)\Delta x,(j-1)\Delta y,k-1)\Delta z)$ 的垂直分速度；$\Delta t$ 为时间轴上的差分单元长度。

对公式(2)中等式的两边各参数求时间平均值，得到：

$$\overline{w_{i,j,k}^{n+1}}=\left(\frac{G-F-\overline{F_{ri,j,k,z}^{n}}}{m}\right)\times\Delta t+\overline{w_{i,j,k}^{n}} \tag{3}$$

$t=(n+1)\Delta t$ 时刻，粒子在点$((i-1)\Delta x,(j-1)\Delta y,k-1)\Delta z)$ 的垂直分速度 $w_{i,j,k}^{n+1}$ 可以用平均速度$\overline{w_{i,j,k}^{n+1}}$和随机速度 $w_{i,j,k}^{n+1}{}'$ 的加和，即

$$w_{i,j,k}^{n+1}=\overline{w_{i,j,k}^{n+1}}+w_{i,j,k}^{n+1}{}' \tag{4}$$

为了保证差分稳定性，$w_{i,j,k}^{n}\Delta t\leqslant\Delta z$。

粒子在水平方向的 $x$ 轴和 $y$ 轴上的分运动受空气粘滞力以及随机力的影响。在 $x$ 轴和 $y$ 轴方向，粒子的运动分量 $u$ 和 $v$ 满足：

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}=\frac{-F_{r,x}+F_{s,x}}{m} \tag{5}$$

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}=\frac{-F_{r,y}+F_{s,y}}{m} \tag{6}$$

公式(5)和公式(6)中，$F_{r,x}$ 和 $F_{r,y}$ 分别表示粒子在 $x$ 轴和 $y$ 轴方向上受到的空气粘滞力，$F_{r,x}=6\pi\eta ru$，$F_{r,y}=6\pi\eta rv$；$F_{s,x}$ 和 $F_{s,y}$ 分别表示粒子在 $x$ 轴和 $y$ 轴方向上受到的随机作用力，$\overline{F_{s,x}(t)}=0$，$\overline{F_{s,y}(t)}=0$。故$\overline{u_{i,j,k}^{n+1}}$和$\overline{v_{i,j,k}^{n+1}}$分别为粒子在 $x$ 轴和 $y$轴方向的平均速度，即

$$\overline{u_{i,j,k}^{n+1}}=\frac{\overline{F_{ri,j,k,x}^{n}}}{m}\times\Delta t+\overline{u_{i,j,k}^{n}} \tag{7}$$

$$\overline{v_{i,j,k}^{n+1}}=\frac{\overline{F_{ri,j,k,y}^{n}}}{m}\times\Delta t+\overline{v_{i,j,k}^{n}} \tag{8}$$

式中：$\overline{u_{i,j,k}^{n+1}}$和$\overline{v_{i,j,k}^{n+1}}$由大气的平流决定；$\overline{u_{i,j,k}^{n+1}}$和$\overline{v_{i,j,k}^{n+1}}$分别等于 $x$ 轴和 $y$ 轴方向上的风速。

### 1.2 气溶胶“沉降——扩散”联合动态模型

在大气平流、湍流和地球引力以及随机作用

力的作用下，气溶胶粒子的运动符合公式(4)、(7)和(8)所示的差分运动方程，并使气溶胶同时进行沉降与扩散运动。为了描述气溶胶的运动规律，文中构建了气溶胶“沉降——扩散”联合动态模型，以气溶胶“重心”的垂直坐标的时域变化特征表征气溶胶的沉降，以气溶胶浓度的时域变化特征表征气溶胶的扩散。

气溶胶重心的时域变化特征可以用下式描述：

$$\Xi^{n+1}=\frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}[z_l^n-(w_{i,j,k,l}^n)\Delta t] \tag{9}$$

式中：$\Xi^{n+1}$ 为 $t=(n+1)\Delta t$ 的气溶胶重心垂直坐标；$z_l^n$ 为气溶胶中第 l 个粒子在 $t=n\Delta t$ 的垂直高度；$w_{i,j,k,l}^n$ 为 $t=n\Delta t$ 时刻第 l 个粒子的垂直速度，计算方法见 1.1 节中公式(2)~(4)，在进行沉降计算时，规定 $w_{i,j,k,l}^n\Delta t=\Delta z$；$N$ 为气溶胶中的粒子总数。

气溶胶浓度的时域变化特征可以利用差分形式平流扩散方程描述，即

$$\begin{aligned}\overline{c_{i,j,k}^{n\acute{G}1}}\grave{T}[(&K_{Hi\acute{G}1,j,k}^n\overline{c_{i\acute{G}1,j,k}^n}\acute{G}K_{Hi\acute{H}1,j,k}^n\overline{c_{i\acute{H}1,j,k}^n}\acute{H}2K_{Hi,j,k}^n\overline{c_{i,j,k}^n}\acute{H}\overline{u_{i\acute{G}1,j,k}^n\,c_{i\acute{G}1,j,k}^n}\\&\acute{G}\overline{u_{i,j,k}^n}\,\overline{c_{i,j,k}^n}/\grave{a}x\acute{G}(K_{Hi,j\acute{G}1,k}^n\overline{c_{i,j\acute{G}1,k}^n}\acute{G}K_{Hi,j\acute{H}1,k}^n\overline{c_{i,j\acute{H}1,k}^n}\acute{H}2K_{Hi,j,k}^n\overline{c_{i,j,k}^n}\\&\acute{H}\overline{v_{i,j\acute{G}1,k}^n\,c_{i,j\acute{G}1,k}^n}\acute{G}\overline{v_{i,j,k}^n}\,\overline{c_{i,j,k}^n}/\grave{a}y\acute{G}(K_{Hi,j,k\acute{G}1}^n\overline{c_{i,j,k\acute{G}1}^n}\acute{G}K_{Hi,j,k\acute{H}1}^n\overline{c_{i,j,k\acute{H}1}^n}\\&\acute{H}2K_{Hi,j,k}^n\overline{c_{i,j,k}^n}\acute{H}\overline{w_{i,j,k\acute{G}1}^n}\,\overline{c_{i,j,k\acute{G}1}^n}\acute{G}\overline{w_{i,j,k}^n}\,\overline{c_{i,j,k}^n})/\grave{a}z\acute{G}S_{i,j,k}^n)]\grave{a}t\acute{G}\overline{c_{i,j,k}^n}\end{aligned} \tag{10}$$

式中：$\overline{u_{i,j,k}^{n+1}}$、$\overline{v_{i,j,k}^{n+1}}$、和$\overline{w_{i,j,k}^{n+1}}$、的计算方法见 1.1 节相关内容。公式(9)与公式(10)中关于 $\Delta t$、$\Delta z$ 的设定是不同的，文中采用 Von Nuuman 方法进行差分稳定性分析。

公式(9)、(10)构成了气溶胶“沉降——扩散”联合动态模型。

### 1.3 气溶胶“沉降——扩散”联合动态数值模拟方法

根据气溶胶“沉降——扩散”联合动态模型，在 $t=(n+1)\Delta t$ 时刻，气溶胶重心位置可以根据气溶胶中各粒子在前一时刻的垂直坐标和垂直分速度计算得出。点$((i-1)\Delta x,(j-1)\Delta y,k-1)\Delta z)$处气溶胶中各成分的浓度可以根据该点和周围各点在前一时刻的浓度计算通过递推方法得到。根据该模型，通过设定适当的边界条件、浓度初始分布和粒子垂直初速度，得到一定大气条件下气溶胶浓度和重心的时域变化规律，基本方法如图 1 所示。

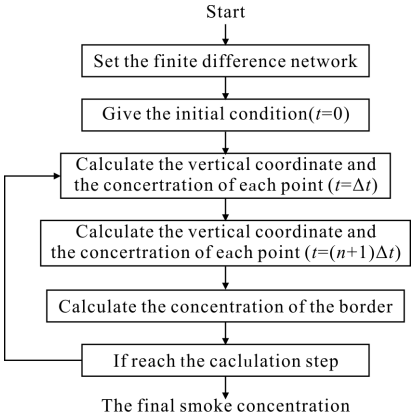


图 1 气溶胶“沉降—扩散”联合动态数值模拟计算方法基本流程

Fig.1 Basic flow of dynamic numerical simulation of aerosol screen sedimentation and diffusion

## 2 数值模拟方法的烟幕箱实验验证

### 2.1 数值模拟

箱内温度 $T$=20 ℃，空气密度 $\rho_{air}$=1.5 g/m$^3$，粘滞系数 $\eta=5.7\times10^{-6}$。假设粒子在烟幕箱中的初始分布服从均匀分布，$c_{i,j,k}^0$=0.653 g/m$^3$，初始速度$\overline{w_{i,j,k}^0}=0$。坐标系设置如图 2 所示。风扇停止搅拌后，烟幕箱内的

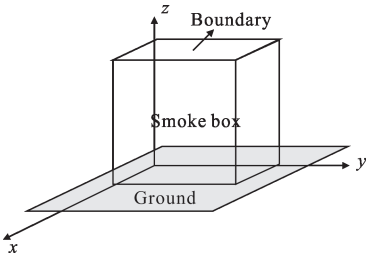


图 2 数值模拟计算过程中坐标系设置示意图

Fig.2 Coordinate system in the simulation

大气平流和湍流近似为零，粒子在垂直方向的运动。公式(10)简化为：

$$\overline{c_{i,j,k}^{n+1}}=(-\overline{w_{i,j,k+1}^n\,c_{i,j,k+1}^n}+\overline{w_{i,j,k}^n\,c_{i,j,k}^n})\frac{\Delta t}{\Delta z}+\overline{c_{i,j,k}^n} \tag{11}$$

那么，烟幕箱中气溶胶质量浓度为：

$$\overline{C_{i,j,k}^{n+1}}=\int_{r_{min}}^{r_{max}}f(r)\overline{c_{i,j,k}^{n+1}}(r)\mathrm{d}r \tag{12}$$

式中：$f(r)$为气溶胶中粒子半径的概率密度函数；$r_{min}$ 和 $r_{max}$ 分别为粒径分布的上、下限。采用激光粒径分析仪测定粒子的粒径分布，并假设粒子粒径服从正态分布，$\bar{r}$=12.6 μm，$\sigma_r$=0.05 μm，$r_{min}$=3 μm，$r_{max}$=25 μm。

采用 Von Nuuman 方法进行差分稳定性分析，当

$\Delta z \geqslant \Delta t \times w$ 时计算结果符合差分稳定性要求。设置 $\Delta t$=5 s，$\Delta z$=10 w。

边界条件选择：除上边界外，所有边界点取临近内点数值；上边界上各点的浓度取 $\overline{C_{i,j,k}^{n}}=0$。

### 2.2 烟幕箱实验

以自主开发的某气溶胶材料作为实验样品，利用防化学院的中型烟幕箱(5.8 m³)测试系统进行气溶胶沉降与扩散实验，烟幕箱测试系统如图 3 所示。表 1 为样品基本参数，$\bar{r}$为粒子平均半径，$M$ 为单次实验投入的样品质量。

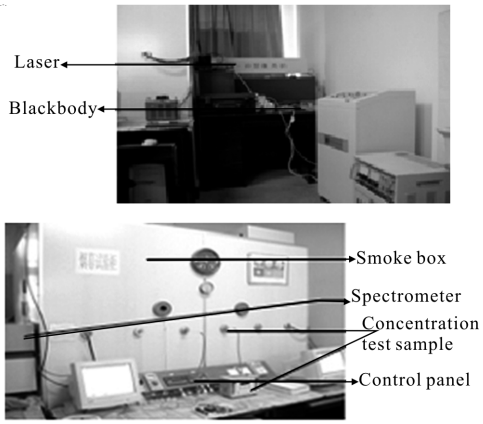


图 3 烟幕箱实验系统

Fig.3 Smoke chamber experiment system

**表 1 样品参数**

**Tab.1 Several parameters of sample**

| $\rho$/g·cm$^{-3}$ | $\bar{r}$/μm | $M$/g |
|---|---|---|
| 1.27 | 12.6 | 1 |

实验按照标准烟幕箱测试流程[12]进行，当风扇停止搅动后同时启动 2 组粉尘采用仪进行采样，采样泵流量为 1 L/min，共采样 3 次，每次采样时间 1 min，间隔 1 min，利用滤膜称重法计算气溶胶的质量浓度，采样结果如表 2 所示。

**表 2 烟幕箱实验浓度采样数据**

**Tab.2 Concentration obtained by smoke chamber experiment**

| Sampling time/min | Sampling concentration/g·m$^{-3}$ | | Mean concentration/g·m$^{-3}$ |
|---|---|---|---|
| 0-1 | 0.671 | 0.635 | 0.653 |
| 2-3 | 0.381 | 0.393 | 0.387 |
| 4-5 | 0.268 | 0.272 | 0.270 |

## 3 实验结果分析

以烟幕箱中心位置作为“采样点”，利用文中给出的模型模拟计算实验开始后该点在不同时刻的粒子浓度，计算结果如图 4 所示。表 3 给出了以烟幕箱中心点为参考点的粒子平均浓度数值模拟计算结果与烟幕箱实验结果的比较，表中 $\Delta C=C_{烟幕箱}-C_{模拟}$。

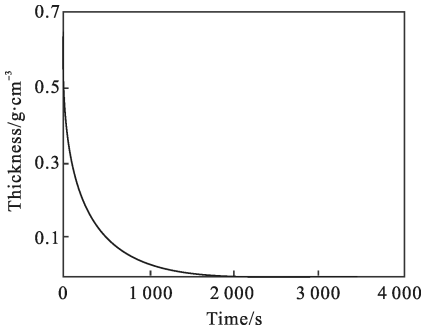


图 4 粒子浓度数值模拟计算结果

Fig.4 Results of numerical simulation experiment

**表 3 数值模拟计算结果与烟幕箱实验结果比较**

**Tab.3 Comparison between numerical simulation experiment and smoke chamber experiment**

| Sampling time/min | Smoke grain mean concentration/g·m$^{-3}$ | | $\Delta c$/g·m$^{-3}$ |
|---|---|---|---|
| | Smoke box | Numerical modeling | |
| 0~1 | 0.653 | 0.653 | 0 |
| 2~3 | 0.387 | 0.418 3 | 0.031 3 |
| 4~5 | 0.270 | 0.232 5 | -0.037 5 |

图 4 中曲线表明烟幕箱中粒子浓度随时间的变化规律服从高斯分布，与其他文献的研究结论是一致的[1,12]。可以利用这一结论，通过烟幕箱浓度采样数据计算粒子的末沉降速度，即

$$C=C_0 e^{-v_\tau t/H} \tag{14}$$

式中：$C_0$ 为烟幕箱中粒子初始浓度；$v_\tau$ 为沉降末速度；$H$ 为烟幕箱高度。由于风扇停止后，烟幕箱中无明显的空气平流或扩散，所以气溶胶粒子仅在垂直方向上按照公式(3)给出的模型垂直下落。根据牛顿第二定律，当粒子运动速度达到 $v_\tau$ 时，粒子在垂直方向上的受力平衡，加速度为 0，并最终以 $v_\tau$ 的速度匀速下落。

表 3 中数据给出的数值模拟计算结果与实测结

果接近，表明文中建立的模型能够较好地模拟粒子的运动。表 3 中差值的存在可能因为以下原因：

(1) 数值模拟计算中，假设粒子服从正态分布并带入计算。而实际上样品的粒径分布虽然可以近似使用正态分布函数进行表征，但是，样品中存在一些特殊粒径的样品，它们的粒径分布情况与正态分布偏离；

(2) 数值模拟计算中，将样品作为球状粒子处理，而该样品的 TEM 图显示其中部分粒子的形状为无规则多面体；

(3) 烟幕箱实验中，采样仪的采样范围为烟幕箱中心附加的一定范围内，而数值模拟计算中以烟幕箱中心点作为考察点。

## 4 结　论

文中利用有限差分方法得到了差分形式的气溶胶粒子运动方程和气溶胶平流扩散方程，建立了气溶胶“沉降——扩散”联合动态模型，提出了气溶胶“沉降——扩散”联合动态模拟计算方法，并利用该方法模拟计算某样品在烟幕箱中的浓度随时间的变化，比较模拟计算结果与烟幕箱实验中得到的浓度采样数据。研究结果表明，文中提出的“沉降——扩散”联合动态模型，能够有效模拟研究气溶胶的动态特征、表征气溶胶的空气动力学特性，对研究气溶胶材料和发烟器性能、开展气溶胶干扰动态仿真实验、评估气溶胶干扰效能具有重要意义。但是，由于气溶胶粒子的粒径分布和形状对数值模拟计算结果的准确性收到了一定的影响，因此，在模拟计算过程中需要注意粒子相关参数的设定。在模拟更加复杂的外场试验时，由于外场大气因素的复杂性，模型中平流场($u$、$v$ 和 $w$)和湍流场系数($KH$ 和 $KV$)需要根据经验公式或实测数据进行设置。

**参考文献：**


[1] Cheng Wen, Li Junshan, Feng Fan, et al. Calculation of smoke transmission based on RPPM [J]. ***Laser & Infrated***, 2010, 40(9): 985–988. (in Chinese)
程文, 李俊山, 冯帆, 等. 基于 RPPM 的气溶胶透过率计算方法[J]. 激光与红外, 2010, 40(9): 985–988.

[2] Lin Jianzhong, Wang Weixiong. Numerical simulation of the sedimentation of cylindrical particles [J]. ***Journal of Engineering Thermophysics***, 2002, 23 (5): 631 –633. (in Chinese)
林建忠, 王巍雄. 柱状粒子沉降的数值模拟 [J]. 工程热物理学报, 2002, 23(5): 631–633.

[3] Fan Long, Yang Chao, Yu Gengzhi, et al. Empirical correlation of drag coefficient for dettling slender particles with large aspect ratio[J]. ***Journal of Chemical Industry and Engineering(China)***, 2003, 54(10): 1501–1503. (in Chinese)
范龙, 杨超, 禹耕之. 大长径比细长颗粒的沉降实验和曳力系数的关联[J]. 化工学报, 2003, 54(10): 1501–1503.

[4] Zhang Zhili, Zhang Xu. False diffusion control in simulation of pollutants′ diffusion in air [J]. ***Journal of Tongji University***, 2004, 32(1): 35–38. (in Chinese)
张智力, 张旭. 污染物大气扩散数值模拟中伪扩散的控制[J]. 同济大学学报, 2004, 32(1): 35–38.

[5] De Han P, Rotach M.W. A novel approach to atmospheric dispersion modeling: the puff-particle model [J]. ***Q J R Meteorol Soc***, 1998, (124): 2771–2792.

[6] Turner D B. Atmospheric dispersion modeling—a critical review[J]. ***Air Pollut Control Ass***, 1979, 29(2): 502–519.

[7] DITLEVSENOVE. Stochastic models for atmospheric particle dispersion [J]. ***Probabilistic Engineering Mechanics***, 2003, 18: 97–106

[8] Huang Mingquan, Gao Junlin, Xiao Kaitao, et al. Numerical simulation of smoke screen diffusion [J]. ***Initiators & Pyrotechnics***, 2006, (6): 19–21. (in Chinese)
黄明犬, 高钧麟, 肖凯涛, 等. 气溶胶扩散的数值模拟[J]. 火工品, 2006, (6): 19–21.

[9] MATT K, HUILIER D. Monte-Carlo simulation of turbulent gas-particle dispersion without gravity: effect of inertia and nonlinear drag [J]. ***Heat Mass Transfer***, 2001, 28 (5): 631–640

[10] Xuan Jie. Physical Simulation of Atmospheric Diffusion[M]. Beiing: China Meteorological Press, 2000. (in Chinese)
宣捷. 大气扩散的物理模拟[M]. 北京: 气象出版社, 2000.

[11] Richard Danaus. Smoke Dust and Haze Fundamentals of Aerosol Behavior [M]. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1977.

[12] Yao Lujiu, Gao Junling, Xiao Kaitao, et al. Theory and Testing Technique of Smoke [M]. Beijing: National Defence Industry Press, 2004. (in Chinese)
姚禄玖, 高钧麟, 肖凯涛, 等. 气溶胶理论与测试技术[M]. 北京：国防工业出版社，2004.