

FLUENT 对云凝结核计数器云室内 气流特征的模拟研究

于仁杰¹ 赵春生^{1,†} 薛惠文¹ 马楠¹ 陶江川¹ 付仕佐¹ 张健鹏²
旷焱¹ 刘宏剑¹ 边宇轩¹

1. 北京大学物理学院大气与海洋科学系, 北京 100871; 2. 北京大学工学院湍流与复杂系统国家重点实验室, 北京 100871;
† 通信作者, E-mail: zcs@pku.edu.cn

摘要 运用计算流体力学模型 ANSYS FLUENT, 对 DMT 公司的恒流热梯度云凝结核计数器(CCNC)云室内的流场、温度场以及水汽场进行模拟。依据外场观测和室内实验中的常用进气流速 0.0164, 0.0185, 0.0205, 0.0226 和 0.0246 m/s 以及云室温差 2, 8 和 17 K, 对比不同进气流速和云室温差对云室内流场的影响。结果显示, 云室内的速度场和温度场均受进气流速和云室温差的影响。当云室温差为 8 K, 进气流速为 0.0205 m/s 时, 模拟出的云室中心线的过饱和度约为 0.27%, 较好地模拟出云室内的水汽过饱和状态。

关键词 云凝结核计数器(CCNC); ANSYS FLUENT; 速度场; 温度场; 水汽场

中图分类号 P414

Simulation of Flow in Continuous-Flow Cloud Condensation Nuclei Counter (DMT-CCNC)

YU Renjie¹, ZHAO Chunsheng^{1,†}, XUE Huiwen¹, MA Nan¹, TAO Jiangchuan¹, FU Shizuo¹,
ZHANG Jianpeng², KUANG Ye¹, LIU Hongjian¹, BIAN Yuxuan¹

1. Department of Atmospheric and Oceanic Sciences, School of Physics, Peking University, Beijing 100871; 2. State Key Laboratory for Turbulence & Complex Systems, College of Engineering, Peking University, Beijing 100871;
† Corresponding author, E-mail: zcs@pku.edu.cn

Abstract The velocity, temperature and humidity in the chamber of the Continuous Flow Streamwise Thermal-Gradient CCN Counter manufactured by DMT were successfully simulated using the computational fluid dynamics software ANSYS FLUENT. With velocity of 0.0164, 0.0185, 0.0205, 0.0226, 0.0246 m/s and temperature settings of ΔT 2, 8 and 17 K, the influence of velocity and temperature on the flow were tested. Results show that, velocity and temperature setting of CCNC influenced both velocity field and temperature field. When $\Delta T=8$ K, $v=0.0205$ m/s, the supersaturation on the centerline was about 0.27%. Supersaturation in the CCNC chamber was simulated successfully.

Key words CCNC; ANSYS FLUENT; velocity field; temperature field; water vapor field

大气气溶胶可以作为云凝结核(cloud condensation nuclei, CCN), 影响云的微观特性。在液态水含量不变的前提下, 气溶胶增多会导致云滴数浓度增加而粒径变小, 提高云的反射率, 反射更多太阳短波辐射。另外, CCN 也会对降水过程产生影响。

CCN 数浓度的增加, 在使平均云滴粒径变小的同时, 还会阻碍降水的发展, 进而增加云的寿命, 从而使云总量增加, 同样会反射更多的太阳辐射^[1]。所以, 研究气溶胶的活化特性, 即气溶胶作为 CCN 的能力, 是研究气溶胶-云相互作用以及气溶胶对

于天气和气候影响的关键内容^[2]。

CCN 计数器(CCN counter, CCNC)是直接观测 CCN 数浓度的仪器, 由 DMT (Droplet Measurement Technologies)公司研发的 CCNC 广泛应用于实验研究和外场观测中。Rose 等^[3]对 CCNC 的测量不确定性进行了研究, 发现主要原因之一是 CCNC 云室内过饱和度的不确定性, 而过饱和度受进气流量、云室温差和压强等因素的影响。为了更好地了解 CCNC 云室内气流的上述特征, 需要利用 ANSYS FLUENT 进行模拟。

FLUENT 是目前处于世界领先地位的商业计算流体动力学(computational fluid dynamics, CFD)软件包, 采用离散化的数值方法对流体的流动与传热现象进行数值模拟和分析。通过 CFD 模拟, 可以分析并且显示流体在流动过程中发生的各种现象, 及时预测流体在模拟区域的流动性能, 并通过改变各种参数, 得到相应过程的最佳设计参数。Steatmann 等^[4]为了探究影响水基凝结核计数器 (Water Condensation Particle Counter, WCPC)计数效率的因素, 曾经利用 FLUENT, 并结合细粒子模型(Fine Particle Model, FPM), 对 WCPC 内的流场和粒子的增长过程进行模拟, 得到 WCPC 内温度、水汽和水汽过饱和度的分布, 结论是 WCPC 的计数效率主要受到其内部水汽过饱和度的影响, 与粒子的物理化学性质也有关系。Herrmann 等^[5-6]也曾经将 FLUENT 与 FPM 结合, 模拟层流扩散云室(laminar flow diffusion chamber, LFDC)中的流场, 发现载流气体(carrier gas)的气压对粒子活化过程有影响。

本文使用由 ANSYS 公司最新发布的 ANSYS FLUENT 16.0, 模拟 CCNC 云室内的速度场、温度场和水汽场, 并研究进气流量和云室温差的变化对上述特征的影响。

1 CCNC 云室简介

本研究模拟的 CCNC 云室是由 DMT 公司研制的 CCN-200 连续流纵向热梯度扩散云凝结核计数器(Continuous-Flow Streamwise Thermal-Gradient CCN Counter)^[7]中的云室(图 1)。圆筒云室垂直放置, 顶部有一进气口, 底部为出气口。进气分为样气(sample inlet)和鞘气(sheath flow inlet)。样气携带气溶胶粒子且经过干燥, 鞘气在仪器内部经过过滤和加湿, 从顶端通入主体云室内。鞘气为样气提供一个没有气溶胶粒子的保护层, 从而将气溶胶粒子限

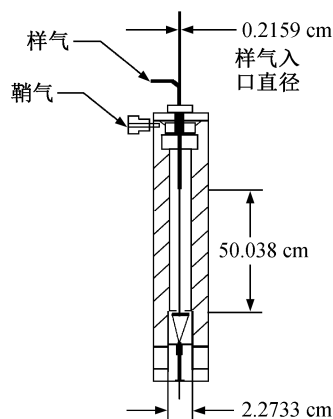


图 1 CCNC 云室示意图

Fig. 1 CCNC chamber

制在云室的中心线附近。云室内部的进气口是一根直径为 0.2159 cm 的细管, 进气口到出气口的距离为 50.038 cm, 云室内部直径为 2.2733 cm。

云室中水汽过饱和的产生是由于水汽分子和空气分子扩散速度不同^[8]。圆筒云室顶部的温度为环境温度或稍高于环境温度, 底部比顶部温度高。本研究中将云室顶部与底部的温度差值 ΔT 简称为云室温差。由于云室圆筒壁的材料具有良好的导热性, 使筒壁上的温度梯度几乎为定值。云室上冷下热的温差和筒壁上恒定的温度梯度决定了云室内部的温度场。同时, 湿润的圆筒壁上水汽是饱和的, 沿着内壁, 水汽梯度也几乎为定值。水汽从圆筒壁向中心扩散, 与加湿后的鞘气共同作用, 形成云室内的水汽场。在圆筒内部, 由于空气分子的平均分子量大于水汽分子, 所以空气分子比水汽分子的扩散速度慢。如图 2 所示, 在中心线 C 处的水汽分子

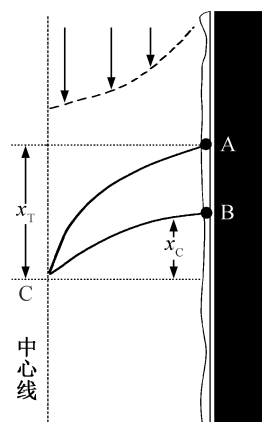


图 2 CCNC 中产生水汽过饱和的原理

Fig. 2 Theory of supersaturation generation of CCNC chamber

来自 B 处, 经过的路程为 x_C , C 处的空气分子来自 A 处, 经过的路程为 x_T , 且 $x_C < x_T$ 。因此, C 处的实际水汽压与 B 处相等, 而温度与 A 处相等且低于 B 处。那么, 在 C 处就产生水汽的过饱和状态。

2 实验设置

2.1 FLUENT 程序

本研究使用 ANSYS 公司最新发布的 ANSYS FLUENT 16.0。FLUENT 包含 3 个部分: 前处理、求解器和后处理。其中, 前处理用于计算对象的建模以及网格的生成和处理。本文使用的前处理器是由 FLUENT 公司自主开发的专用 CFD 前置处理器 GAMBIT。将前处理器生成的网格读入 FLUENT 后, 剩下的操作都在 FLUENT 中完成, 包括设置边界条件、定义材料性质、执行求解、根据计算结果优化网格以及对计算结果进行后处理等。后处理器则是在完成流场的计算后, 对计算结果进行显示、存贮和输出。FLUENT 附带强大的后处理功能, 可以对计算结果进行云图、等值线图、矢量图、剖面图、 x - y 散点图、粒子估计图和动画等多种方式显示^[9]。

2.2 基本设置

首先确定计算区域的几何模型。GAMBIT 创建的几何模型是半径为 0.0113665 m, 高 0.50038 m 的三维圆柱腔体, 与云室实际大小相等。坐标原点设置在圆柱体的底面中心, z 轴取向上为正。

为了得到适合模型的高质量网格, 本文采用一种公认的圆柱体网格划分方法——“钱币法”^[10]。这种方法因其对圆柱截面的网格划分形状类似钱币而得名, 优点是网格点之间排列有序且有规则, 计算精度高, 计算效率也较高。

另外, 设置合理和最接近实际的边界条件是获得精确计算结果的必要前提。FLUENT 提供了入口边界、出口边界和壁面等一系列边界条件^[11]。本研究中, 初始边界条件的设置包括进气口有一定的初始速度、进气口及出气口处的压强为一个标准大气压以及圆筒壁边界处的流体无滑动。

2.3 模拟实验

2.3.1 速度场模拟

在进行速度场模拟前, 首先要确定云室内气流的流动状态是层流还是湍流。已知空气的黏性系数

$$\mu_{\text{air}} = 1.5 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}, \quad (1)$$

那么, 云室内气流的雷诺数为

$$\text{Re} = \rho v d / \mu_{\text{air}} = (1.29 \text{ kg/m}^3 \times 0.02 \text{ m/s} \times 1.13665 \times 10^{-2} \times 2 \text{ m}) / (1.5 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}) = 38, \quad (2)$$

其中, ρ 为空气的密度, v 为根据外场实验中常用的进气流量计算出的云室内气流的速度, d 为云室的直径。计算得到的雷诺数 $\text{Re} < 2000$, 所以在本研究中, 云室内的气体以层流的形式流动^[12]。

在外场观测和标定实验中, CCNC 的进气流量通常选取 500 mL/min^[13], 参照文献[14], 本文选取 5 组不同的进气流量, 分别为 400, 450, 500, 550 和 600 mL/min, 换算成流速则分别为 0.0164, 0.0185, 0.0205, 0.0226, 0.0246 m/s。

2.3.2 温度场模拟

云室顶端的实际温度总是保持在室温或稍高于室温, 本研究统一将进气口温度设置为 303 K。由于云室内壁材料有良好的导热性, 所以云室内壁的温度梯度几乎为定值。模拟内壁温度分布的方法可以用下式概括:

$$t(z) = 303 \text{ K} + z / 0.50038 \text{ m} \times \Delta T, \quad (3)$$

式(3)中, 303 K 为进气口温度, 0.50038 m 为圆筒的高度, $t(z)$ 为筒壁上纵坐标 z 处的温度, ΔT 为云室温差。

通常每一组完整的标定实验都需要对 CCNC 在 2~17 K 范围内设置 6 个不同的云室温差, 分别是 2, 3, 5, 8, 11 和 17 K^[14-15]。在外场实验中, 云室温差也取值在 2~17 K 区间内, 常用的外场 ΔT 设置为 8 K。在本研究中, 分别选取最小值 2 K、常用值 8 K 和最大值 17 K 来模拟不同云室温差下云室内速度场和温度场的差异。

2.3.3 水汽场模拟

在模拟内壁上的水汽饱和状态时, 本研究利用流体介质的传输性, 赋值离壁面最近的网格点的水汽含量为其相应温度下的饱和水汽质量分数, 并设为固定值, 从而实现水汽从饱和的壁面向中心扩散的机制^[16]。具体实现过程可以用下式概括:

$$0.0113665 - \sqrt{x^2 + y^2} < 0.001, \quad (4)$$

其中, 圆筒的半径为 0.0113665 m, 格点的坐标为 (x, y, z) 。当格点与圆筒半径的差值足够小时, 认为此格点位于圆筒内壁, 此处水汽应为饱和状态。根据克拉伯龙-克劳修斯方程, 可以得到格点的饱和水汽压:

$$e_s = 610.7 \exp(6821(1/t_0 - 1/t) - 5.13 \log(t/t_0)), \quad (5)$$

其中, e_s 为格点的饱和水汽压(Pa), $t_0 = 273.15$ K, t 为格点的温度。则格点的水汽质量分数^[17]为

$$c = (18e_s)/(29 \times 101325), \quad (6)$$

其中, 水的分子量为 18, 空气的分子量为 29, 一个标准大气压为 1013.25 hPa。由于鞘气是经过加湿的, 含有水汽的进气与圆筒内壁扩散的水汽共同作用, 形成圆筒内的水汽场。

3 模拟结果

3.1 速度场

图 3 显示云室温差 ΔT 为 2, 8 和 17 K, 进气流速 v 为 0.0205 m/s (即进气流量为 500 mL/min) 时, 模拟得到的云室内速度场。可以看到, 云室内气体流动状态为层流。在筒壁上, 流速为零, 越靠近中心线处速度越大。气流经过入口处一小段路径后, 速度逐渐稳定。图 4 显示云室温差 ΔT 为 2, 8 和 17 K, 进气流速 v 从 0.0164 m/s 到 0.0246 m/s 变化时, 云室中部与进气口和出气口等距离处速度分布的变化。可以看到, 在某一确定的云室温差下, 随着进气流速的增大, 云室内气流的流速也增大; 对于某一确定的进气流速, 当云室温差增大时, 云室内气流的流速也稍有增大。可见, 进气流速和云室温差的变化都会影响云室内的速度场, 其中云室温差对速度场的影响较小。

3.2 温度场

图 5 显示云室温差 ΔT 为 2, 8 和 17 K, 进气流速 v 为 0.0205 m/s 时, 模拟得到的云室内温度场。可以看到, 云室的入口处温度低, 出口处温度高, 且壁面上的温度梯度几乎为定值。由于受云室内气

流流速的影响, 温度等值线呈抛物线状分布。云室中部与进气口和出气口等距离处的温度如图 6 所示, 可以看到, 在某一确定的云室温差下, 随着进气流速的增大, 温度等值线曲率增大; 对于某一确定的进气流速, 当云室温差增大时, 温度等值线曲率增大。可见, 云室内的温度场受进气流速和云室温差影响。

3.3 水汽场

当云室温差 ΔT 为 8 K, 进气流速 v 为 0.0205 m/s 时, 模拟得到的云室内水汽压分布如图 7 所示。云室入口处温度为 303 K, 出口处温度为 311 K。进气中水汽的质量分数设置为 0.03, 在 303 K 温度下鞘气中的水汽未饱和。从图 7 可以看到云室内壁上水汽饱和。在加湿的鞘气和圆筒壁水汽扩散的共同作用下, 水汽压等值线为抛物线状, 且中心线处的水汽压低于壁面处。相对湿度 f 表示空气接近饱和的程度:

$$f = \frac{e}{E} \times 100\%, \quad (7)$$

其中, e 为水汽压, E 为同一温度下的饱和水汽压。根据克拉伯龙-克劳修斯方程, 可以由温度场得到云室内饱和水汽压的分布(图 8)。由于云室出口处比入口处温度高, 使得出口处的饱和水汽压大于入口处, 且饱和水汽压的分布特征与温度场的特征相似, 中心线的饱和水汽压低于壁面处。进而, 由水汽压场和饱和水汽压场可以得到云室内的相对湿度场(图 9)。从图 9 可以看到, $f > 100\%$ 的区域为过饱和, 云室内中心线均处于过饱和状态。当云室温差 ΔT 为 8 K, 流速 v 为 0.0205 m/s 时, 云室中心线的

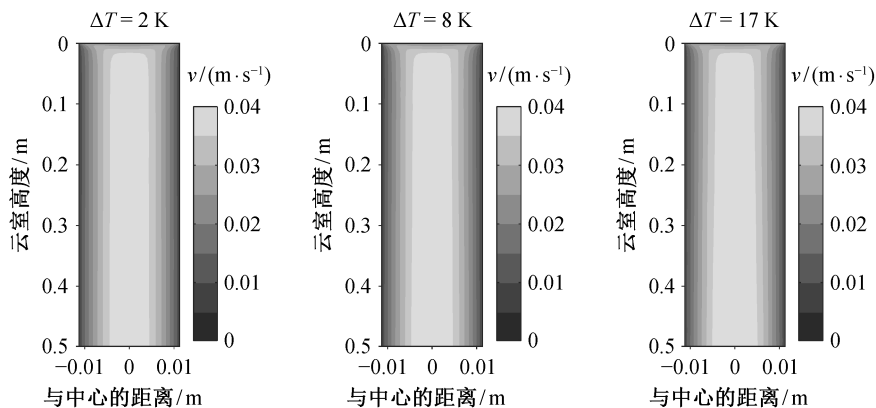


图 3 云室温差为 2, 8 和 17 K, 进气流速为 0.0205 m/s 时的云室内速度场

Fig. 3 Velocity field in CCNC chamber when ΔT is set respectively at 2, 8, 17 K, and inlet flow velocity is 0.0205 m/s

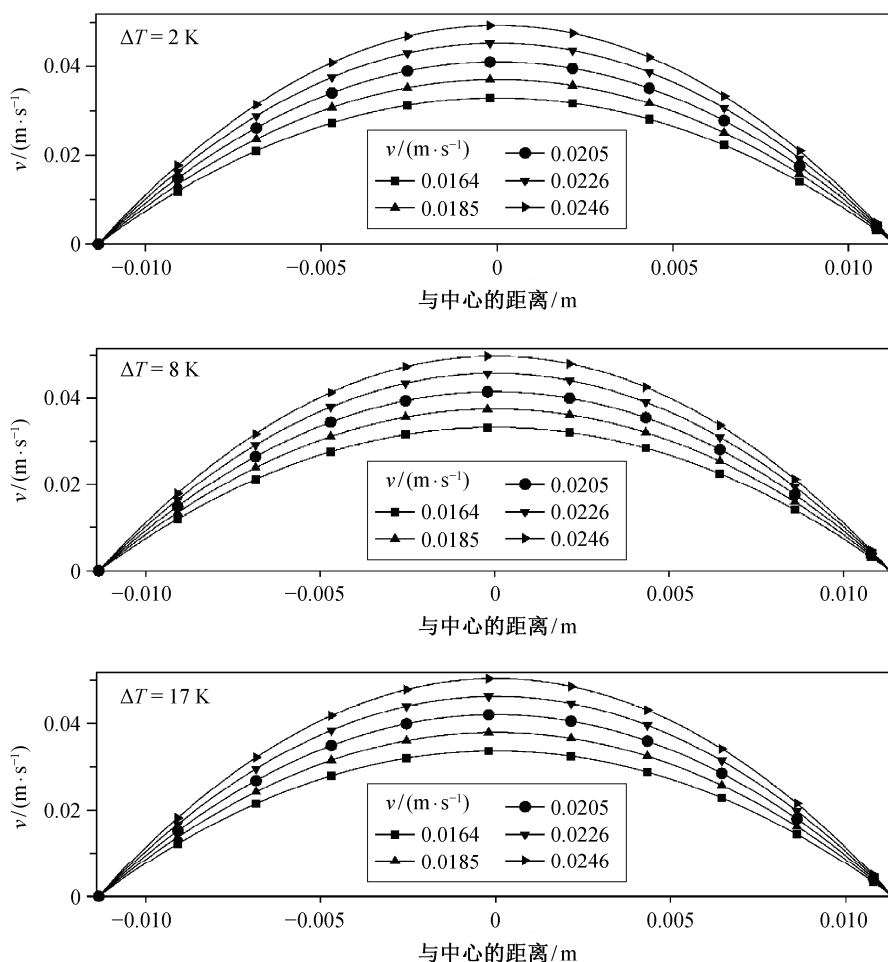


图 4 云室温差为 2, 8 和 17 K, 进气流速从 0.0164 m/s 到 0.0246 m/s 变化时云室中部速度分布的变化
 Fig. 4 Velocity results in the middle of CCNC chamber when ΔT is set respectively at 2, 8, 17 K, and inlet flow velocity varies from 0.0164 m/s to 0.0246 m/s

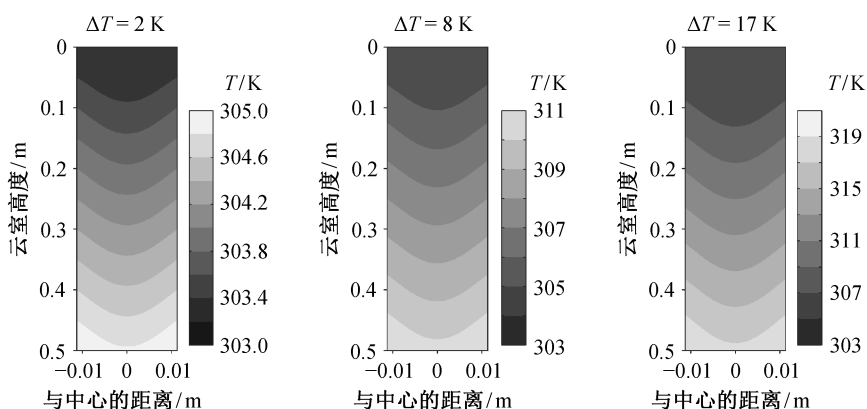


图 5 云室温差为 2, 8 和 17 K, 进气流速为 0.0205 m/s 时云室内温度场
 Fig. 5 Temperature field in CCNC chamber when ΔT is set respectively at 2, 8, 17 K, and inlet flow velocity is 0.0205 m/s

最小过饱和度为 0.27%，最大过饱和度为 16%。当改变云室温差和进气流速时，云室内相对湿度场会相应变化，从而对云室内气溶胶的活化产生影响。

Lathem 等^[16]使用 Roberts 等^[8]的连续流纵向热梯度扩散云凝结核计数器(Continuous Flow Streamwise Thermal-Gradient CCNC, CFSTGC)仪器

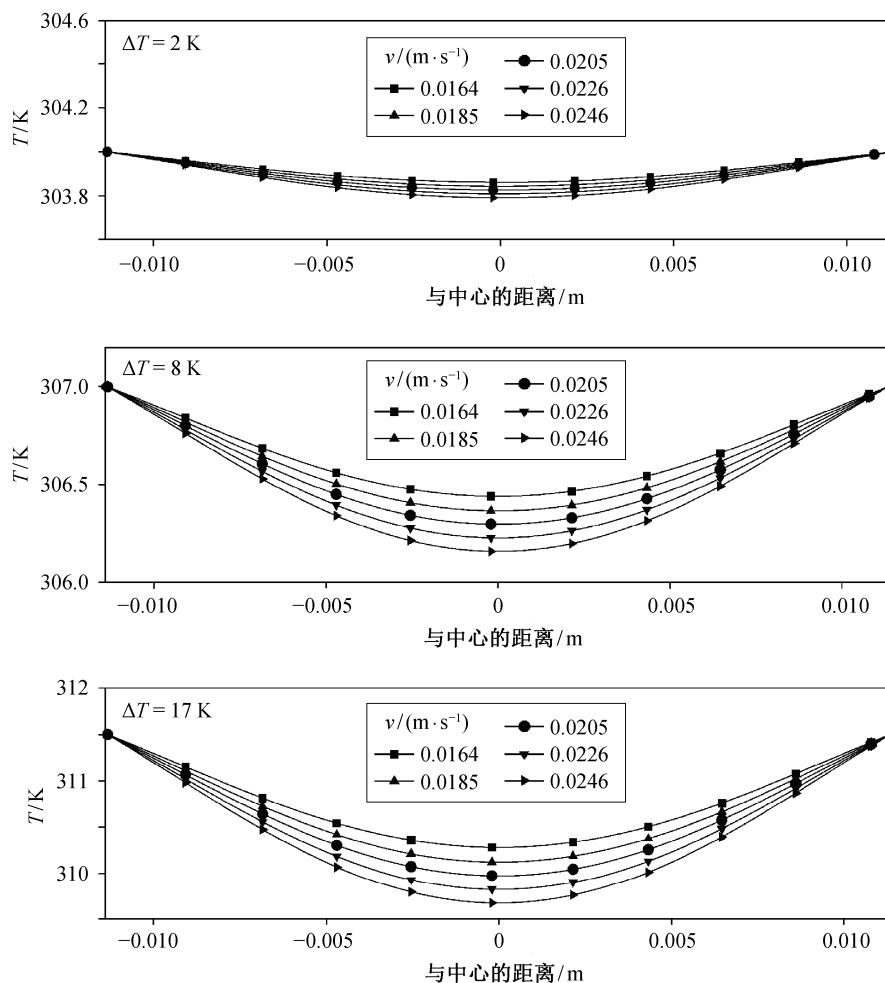


图 6 当云室温差为 2, 8 和 17 K, 进气流速从 0.0164 m/s 到 0.0246 m/s 变化时云室中部温度分布的变化
 Fig. 6 Temperature in the middle of CCNC chamber when ΔT is set respectively at 2, 8, 17 K, and inlet flow velocity varies from 0.0164 m/s to 0.0246 m/s

模式, 计算不同气溶胶浓度下云室中心线处的温度和水汽过饱和度。CFSTGC 仪器模式可以计算云室内速度、温度和水汽浓度的分布。模式的输入变量有流量、鞘气和样气的流量比、气压、云室温差。模式计算得到的过饱和度分布用来计算 CCNC 内粒子的吸湿增长和活化。Lathem 等^[16]的实验设置中, 云室温差为 8 K, 流速为 0.0205 m/s, 气压为 1000 hPa, 通入的气溶胶粒子为 $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ 。当气溶胶的浓度为 $1/\text{cm}^3$ 时, 云室内水汽的过饱和度代表未通入气溶胶时的值。计算结果为, 在经过入口后, 水汽过饱和度达到最大, 最大过饱和度约为 0.33%; 然后, 由于温度升高, 过饱和度缓慢下降。

对比 Lathem 等^[16]的研究可以知道, 本研究较好地模拟出云室内大部分区域水汽过饱和的状态,

但是在接近入口处, 本研究模拟的水汽最大过饱和度和大于 Lathem 等^[16]的计算结果。这一差异的产生可能有两个原因。一是由于云室内绝对温度的不同。Lathem 等^[16]设置的云室顶部温度为 293 K, 而本研究中云室顶部温度设置为 303 K。二是本研究中的进气并未区分样气和鞘气。在仪器内部, 鞘气经过过滤和加湿从顶端通入主体云室内, 干燥后的样气则在鞘气的环绕下流过云室的中心线附近。本研究加湿的气体流经入口的中心线附近时, 可能使入口附近中心线处的水汽过饱和度升高, 从而使模拟结果与 Lathem 等^[16]的计算结果在入口附近中心线处的水汽过饱和度存在差异。

4 结论

本文基于 CCNC 云室内产生过饱和度的原理,

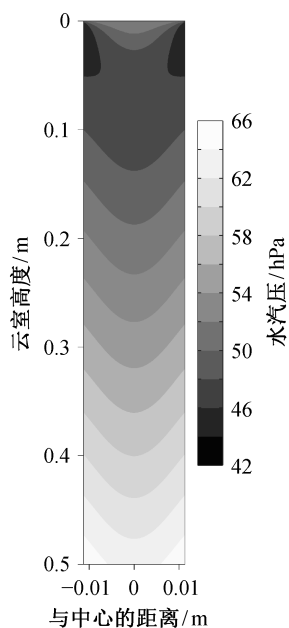


图 7 云室温差 $\Delta T = 8\text{ K}$, 进气流速 $v = 0.0205\text{ m/s}$ 时云室内水汽压

Fig. 7 Vapor pressure field in CCNC chamber when ΔT is set at 8 K, and inlet flow velocity is 0.0205 m/s

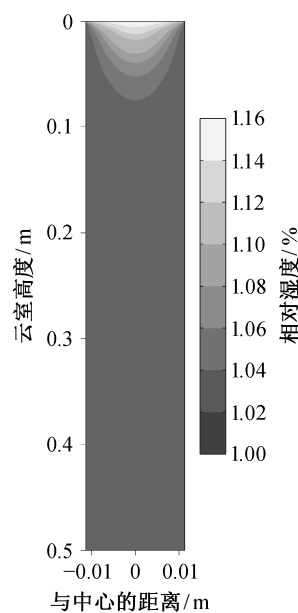


图 9 云室温差 $\Delta T = 8\text{ K}$, 进气流速 $v = 0.0205\text{ m/s}$ 时云室内相对湿度

Fig. 9 Relative humidity field in CCNC chamber when ΔT is set at 8 K, and inlet flow velocity is 0.0205 m/s

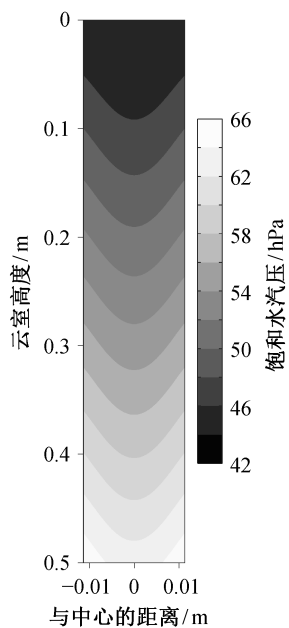


图 8 云室温差 $\Delta T = 8\text{ K}$, 进气流速 $v = 0.0205\text{ m/s}$ 时云室内饱和水汽压

Fig. 8 Saturation vapor pressure field in CCNC chamber when ΔT is set at 8 K, and inlet flow velocity is 0.0205 m/s

采用计算流体力学软件 ANSYS FLUENT 对 CCNC 云室内速度场、温度场和水汽场进行模拟, 并通过改变进气的流速和云室温差, 对比不同进气流速和

云室温差对云室内流场的影响, 结果如下。

1) CCNC 云室内的气体流动状态为层流。靠近云室壁面处的气体流速为零, 中心线处的气体流速最大, 且速度分布呈抛物线状。云室内的速度场受云室温差的影响较小。

2) 云室顶部温度低, 底部温度高, 壁面上的温度呈线性分布。由于受云室内气流速度的影响, 温度等值线呈抛物线状。云室内的温度场受进气流速和云室温差影响。

3) 本研究较好地模拟出云室内的水汽过饱和状态。但是, 本研究模拟的水汽最大过饱和度大于 Latham 等^[16]的模拟结果(约 0.33%)。可能的原因是由于进气未区分样气和鞘气, 从而使云室入口附近中心线处的水汽过饱和度增大。在以后的工作中, 可以对此进行改进。

参考文献

- [1] Lohmann U, Feichter J. Global indirect aerosol effects: a review. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2005, 5(3): 715-737
- [2] Solomon S. *Climate change 2007 — the physical science basis. Working Group I: Contribution to the fourth assessment report of the IPCC*. New York:

- Cambridge University Press, 2007: Vol. 4
- [3] Rose D, Gunthe S S, Mikhailov E, et al. Calibration and measurement uncertainties of a continuous-flow cloud condensation nuclei counter (DMT-CCNC): CCN activation of ammonium sulfate and sodium chloride aerosol particles in theory and experiment. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2008, 8(5): 1153–1179
- [4] Stratmann F, Herrmann E, Petaja T, et al. Modelling Ag-particle activation and growth in a TSI WCPC Model 3785. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2010, 3(1): 273–281
- [5] Herrmann E, Lihavainen H, Hyvarinen A P, et al. Nucleation simulations using the fluid dynamics software FLUENT with the fine particle model FPM. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2006, 110(45): 12448–12455
- [6] Herrmann E, Hyvarinen A P, Brus D, et al. Re-evaluation of the pressure effect for nucleation in laminar flow diffusion chamber experiments with FLUENT and the fine particle model. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2009, 113(8): 1434–1439
- [7] Lance S, Medina J, Smith J N, et al. Mapping the operation of the DMT continuous flow CCN counter. *Aerosol Science and Technology*, 2006, 40(4): 242–254
- [8] Roberts G, Nenes A. A continuous-flow streamwise thermal-gradient CCN chamber for atmospheric measurements. *Aerosol Science and Technology*, 2005, 39(3): 206–221
- [9] ANSYS Inc. ANSYS FLUENT 12.0 user's guide [EB/OL]. (2009–04) [2014–12–05]. <http://users.ugent.be/~mvbelleg/flug-12-0.pdf>
- [10] 王福军. 计算流体动力学分析: CFD 软件原理与应用. 北京: 清华大学出版社, 2004: 160–183
- [11] 李进良, 李承曦, 胡仁喜. 精通 FLUENT 6.3 流场分析. 北京: 化学工业出版社, 2009: 12–50
- [12] 吴望一. 流体力学(上、下). 北京: 北京大学出版社, 1990: 145–199
- [13] 马楠. 华北平原气溶胶光学和活化特性研究[D]. 北京: 北京大学, 2013
- [14] 邓兆泽, 赵春生, 马楠, 等. 一种快速测量高粒径分辨率气溶胶活化率曲线的方法. *北京大学学报: 自然科学版*, 2012, 48(3): 386–392
- [15] Wang Z B, Su H, Wang X, et al. Scanning supersaturation CPC applied as a nano-CCN counter for size-resolved analysis of the hygroscopicity and chemical composition of nanoparticles. *Atmospheric Measurement Techniques Discussions*, 2014, 7(11): 11137–11168
- [16] Latham T L, Nenes A. Water vapor depletion in the DMT continuous-flow CCN chamber: effects on supersaturation and droplet growth. *Aerosol Science and Technology*, 2011, 45(5): 604–615
- [17] 盛裴轩, 毛节泰, 李建国, 等. 大气物理学. 北京: 北京大学出版社, 2003: 290–352