对于颗粒在空气中自由沉降的研究

李至丹

2020年7月5日

1 简要介绍

在最近的一段时间内,新冠病毒疫情成为全人类共同的话题。而在疫情的防控当中,对于病毒介质的传播的研究十分重要。通过对于实际情况的简化,可以认为:传播过程当中相当于颗粒在空气当中,在重力场下的自由沉降的情况,对于原问题的研究可以近似为对于颗粒在空气中自由沉降的研究。

在这个问题当中,如果不在重力场当中,根据爱因斯坦理论 $m\vec{a}+\mu\vec{v}=f$,在随机力 f 作用下,进行一系列分析,可以得到 $< r^2> = \frac{6k_BT}{\mu}t$ 的近似结论。然而,在重力场当中,这样的结论显然不适用,但可以给研究一些启发。

本文将从对于爱因斯坦理论的研究出发,通过对于爱因斯坦理论的改进,进行理论分析和相应的数值模拟,最终得出颗粒在空气中自由沉降的一个研究结论。

2 理论分析

在爱因斯坦对于布朗运动的研究当中,颗粒的运动方程为: $m\vec{a} + \mu \vec{v} = f$ 。消去随机力的影响之后,可以得到: $< r^2 >= \frac{6k_BT}{\mu}t$ 。但是这个结论没有什么用处,因为我们根本不知道颗粒分布的情况,也不知道加上重力之后会发生什么。但是,对于我们的研究,会起到一定的辅助作用。

2.1 颗粒物之间的碰撞情况

在这个问题当中,我们需要考虑颗粒之间是否存在有碰撞的情况。首先忽略空气分子的影响,我们可以得到颗粒的平均自由程为:

$$\lambda = \frac{V}{\sqrt{2}\pi d^2 N}$$

根据颗粒的数量和密度可以计算得到: $\sqrt{2\pi}d^2N \approx 10^{-11} \sim 10^{-5}$ 。

相对于颗粒的运动过程而言,平均自由程较大,所以我们的理论研究上 忽略颗粒之间碰撞的影响。

2.2 水平方向上的分布情况

因为重力只作用在竖直方向上面。所以,我们考虑将水平方向和竖直方 向分开进行考虑。

做这样的定义: 假设竖直方向为坐标轴的 \vec{k} 方向,我们这样表示一个坐标:

$$\begin{aligned} x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k} &= \vec{s} + \vec{h} = \vec{r} \\ x\vec{i} + y\vec{j} &= \vec{s} \\ z\vec{k} &= \vec{h} \end{aligned}$$

现在,只考虑坐标 \vec{s} 的情况。运用爱因斯坦的理论,可以得到:

$$m\frac{d^2\vec{s}}{dt^2} + \mu \frac{d\vec{s}}{dt} = \vec{f}$$

再根据分子动理论,可以得到水平方向上面的动能为: $\frac{1}{2}m\left(\frac{d\vec{s}}{dt}\right)^2=2\times\frac{1}{2}k_BT$ 。

所以,可以得到水平方向上应该满足的关系为

$$\langle s^2 \rangle = \frac{4k_BT}{\mu}t$$

现在,考虑随机游走过程当中颗粒的变化情况。显然,我们可以得到,在 t 时刻一个在 $\vec{s}(t)$ 位置的颗粒,在 Δt 时间后,将会满足下列式子:

$$\vec{s}(t + \Delta t) = \vec{s}(t) + \Delta s$$
$$s^{2}(t + \Delta t) = s^{2}(t) + 2\Delta s \cdot \vec{s}(t) + \Delta s^{2}$$

在随机情况下, 我们认为: $2\Delta s \cdot \vec{s}(t)$ 的平均为 0, 所以, 可以得到:

$$\langle s^2 \rangle = \frac{\langle \Delta s^2 \rangle}{\Delta t} t$$

和通过爱因斯坦理论进行对比,我们得到了这样的结论: $\frac{\Delta s^2}{\Delta t} = \frac{4k_BT}{\mu}$ 。这将成为我们之后数值模拟的参数选择。

对于随机游走模型,颗粒的分布应当满足高斯分布:

$$p(x,y) = \frac{1}{2\pi\sigma x\sigma y} e^{-\frac{1}{2}\left[\left(\frac{x-\mu_x}{\sigma x}\right)^2 + \left(\frac{y-\mu_y}{\sigma y}\right)^2\right]}$$

代入之后,可以得到:

$$p(x, y, t) = p(\vec{s}, t) = \frac{1}{2\pi \frac{2k_B T}{\mu} t} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{s^2}{\frac{2k_B T}{\mu} t}\right)}$$

2.3 竖直方向上的分布情况

在竖直方向上,我们需要考虑重力对于颗粒运动的影响。考虑在爱因斯坦方程当中加入重力的影响,我们得到:

$$m\frac{d^2\vec{h}}{dt^2} + \mu\frac{d\vec{h}}{dt} = \vec{f} + m\vec{g}$$

对于随机阻力 \vec{f} ,我们认为在研究当中大小不会改变。现在考虑粘滞力,在低速情况下,可以认为: $\mu = ks = k \left(\frac{d}{s}\right)^2 \pi$ 。

我们将运动分解为纯粹的随机游走和一个额外的竖直方向运动组成。这个额外的运动可以理解为在重力和竖直方向粘滞力的情况之下产生的运动,也就是说:

$$\vec{v} = \frac{m\vec{g}}{\mu} = \frac{2d\rho\vec{g}}{3k}$$

这样,我们分析竖直方向就变得相对而言方便的多,得到最后的分布为:

$$< h^2 > = \left(\sqrt{\frac{2k_BT}{\mu}t} + vt\right)^2$$

运用高斯分布,得到:

$$p(\vec{h}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sqrt{\frac{2k_B T}{\mu}} t} e^{-\frac{1}{2} \frac{(\vec{h} - \vec{v}t)^2}{2k_B T} t}$$

2.4 应用

现在,将我们的理论运用到要解决的问题当中去。

2.4.1 平均悬浮时间和时间分布

显然,我们只用考虑在竖直方向上面的情况。根据方程:

$$p(\vec{h},t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{\frac{2k_BT}{\mu}}t}e^{-\frac{1}{2}\frac{(\vec{h}-\vec{v}t)^2}{\frac{2k_BT}{\mu}t}}$$

代入数值 $k_B=1.38\times 10^{-23}J/K, T=300K, \mu=2.3\times d^2, v=2.2\times d\rho$ 得到:

$$t(d,\rho) = \frac{3kh_0}{2d\rho g} = \frac{0.74}{d\rho}s$$

代入得到最小的期望悬浮时间为 $t_{min} = 51s$,最大为 $t_{max} = 152843s \approx 42 hours$ 。

而时间分布函数则为在时刻 t, 还有多大的概率颗粒保持悬浮。这个函数为:

$$p(t) = \int_{h_0}^{+\infty} p(h, t) dh = \int_{h_0}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sqrt{\frac{2k_B T}{\mu}} t} e^{-\frac{1}{2} \frac{(\vec{h} - \vec{v}t)^2}{\frac{2k_B T}{\mu} t}} dh$$

2.4.2 颗粒的密度分布情况

我们要求的就是将水平方向和竖直方向结合起来的情况。结合计算得到:

$$p(\vec{r},t) = p(\vec{s},t) \times p(\vec{h},t) = \frac{1}{\left(2\pi \frac{2k_BT}{\mu}t\right)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{1}{2}\frac{(\vec{r}-\vec{v}t)^2}{2k_BT}t}$$

2.5 有水平速度时

分别考虑对于水平运动和竖直运动的影响。从分析过程上来说,水平初速度的变化应该对于竖直方向上的时间分布不产生影响。所以讨论水平方向的影响。

将运动分解为水平方向上的减速运动和原来的运动状态,得到:

$$\frac{\mu}{m}\vec{v_s} + \vec{a_s} = 0$$

显然,这个运动快速的衰减,得到: $\vec{v_s} = \vec{v_0} e^{-\frac{t}{m}t}$ 。 计算之后,我们发现: 当 t > 0.1s 时,速度已经衰减到很小。 考虑这个时候的位移:

$$\vec{s} = \int_0^\infty \vec{v_0} e^{-\frac{\mu}{m}t} dt = \vec{v_0} \frac{m}{\mu}$$
 (1)

计算可以得到,这里的偏移最大不超过 0.1*m*,故而空间分布仅仅会在 水平方向上发生一个小量的偏移。

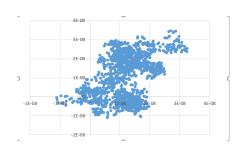
3 数值模拟

直接对我们研究的运动方程:

$$m\vec{a} + \mu\vec{v} = \vec{f} + m\vec{g}$$

进行数值模拟,我们可以得到以下的结果:

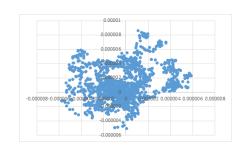
(1) 当颗粒大小较小,直径约为 $10^{-8}m$ 时,在运动短时间之后,分布大约为 这样:



可以看出,大致的分布遵从中心向外扩散,并且颗粒密度的下降比较迅速。相对于我们理论预言的分布情况而言,分布出现了两个中心,这可能是因为粘滞力对于运动的影响较大,随机游走的影响比较大。

(2) 当颗粒较大,直径约为 $10^{-5}m$ 时,在运动了 0.1s 时,分布大约如下图 所示。

可以看出,相对于颗粒较小的情况,我们发现,颗粒较大的时候,分布情况较为符合实际的情况。这个时候粒子聚集在中心,并且向外扩散,越往外衰减的速度越快,这比较符合我们理论预言的分布情况。



从上述的结果来看,不管是较大的颗粒还是较小的颗粒,都可以发现, 粒子的分布都遵从从中心向外扩散的情况,并且衰减的速度比较快。

在粘滞力影响下,颗粒较小的粒子出现了分散的情况,导致和我们理论 预言不是非常符合。但是在较大颗粒的影响上面,粘滞力对粒子分布出现的 影响不是很大。

4 总结反思

从理论分析和数值模拟的结果来看,利用爱因斯坦方程进行分析的做法,符合实际的情况还算不错。至于我们为了简化考虑的情况而忽视的地面问题,在我们模拟的时候发现对于结果的影响不大。除此之外,因为时间有限,在水平方向上面的模拟符合情况并不是很好,并且空气粘滞力的影响过大,甚至抵消了重力加速度,这是我们理论上面不足的地方。

5 参考

- (1) 牛文胜,孙振海,《大气扩散模式的简要回顾》,《气象科技》2000 年第 2 期
- (2) 李旭,徐升华,孙祉伟,《重力对溶液悬浮粒子聚集过程影响的布朗动力学模拟》,《物理化学学报》,2009,25(2),207-212页
- (3) 季向东,李晟,上海交通大学《物理学引论 I 讲义》,2016。