多分散气固颗粒多相流的 UGKWP方法

Xiaojian Yang[a],WeiShyy[a]徐昆[a,b,c,*]

[a]香港科技大学机械与航空航天工程系，香港九龙清水湾[b]香港科技大学数学系，香港九龙清水湾[c]香港科技大学深圳研究院，中国深圳

arXiv:2304.03296v1 [physics.comp-ph] 6 Apr 2023

摘要

具有多个分散固相的气固流动涉及复杂的多相流动力学。本文提出一种用于研究气固颗粒多相流的统一算法。采用气体动理学格式（GKS）模拟连续气相，并针对多个分散固体颗粒相发展了多尺度统一气体动理学波粒（UGKWP）方法。同时，在GKS-UGKWP框架下考虑气相与颗粒相之间的动量和能量交换。对于每个分散固体颗粒相，UGKWP中确定性波和统计粒子的分解基于局部单元的克努森数。固体颗粒相的方法在单元克努森数较小时可转化为欧拉流体方法，在单元克努森数较大时则可转化为拉格朗日粒子方法。由于各个颗粒相的物理性质存在差异，例如颗粒直径、材料密度以及每个控制体内相应的质量分数，因此该方法对于模拟具有不同克努森数的分散颗粒相具有重要意义。对于气相，GKS本质上是用于求解NS方程的欧拉方法。因此，用于气固流动的GKS-UGKWP方法统一了欧拉-欧拉（EE）方法和欧拉-拉格朗日（EL）方法。通过兼顾物理精度和数值效率，可以为固体颗粒相获得最优策略。本文模拟了两种气固流化系统，即一个循环流化床和一个湍流流化床。模拟捕捉到了流化粒子的典型流动结构，流场的时间平均变量与实验测量结果吻合良好。此外，采用所提出的GKS-UGKWP研究了激波与颗粒床的相互作用，从而验证了该方法在超声速条件下多分散气粒系统中的适用性，并考察了颗粒云的动态演化过程。

关键词：统一气体动理学波粒子格式（UGKWP）、气体动理学格式（GKS）、气固流、多分散颗粒流

*通讯作者电子邮箱： xyangbm@connect.ust.hk (Xiaojian Yang), weishyy@ust.hk (Wei Shyy), makxu@ust.hk (KunXu)

提交至爱思唯尔的预印本 *2023*年*4*月*10*日

1. 引言

气固两相流广泛存在于化工、石油、环境等行业。对该系统开展定量研究，对于基础科学研究和实际工业生产都至关重要 [49, 21]。大多数颗粒流系统都包含多种固体颗粒，其材料密度、直径、形状等各不相同，这类流动称为多分散气固流。对于多分散系统，将所有种类的固体颗粒视为单一相可能会产生问题，尤其是在颗粒性质彼此差异显著时。例如，化学反应速率高度依赖颗粒尺寸，因此不能忽视粒径分布（PSD）的影响 [51, 27]。除了气流与固体颗粒之间的相互作用外，固体颗粒之间的相互作用也会对准确预测颗粒行为起重要作用；在气固流领域，这种作用通常通过所谓的固-固曳力来建模 [34, 22]。因此，由于多颗粒系统的复杂性增加，开发用于多分散气固流的先进计算流体力学（CFD）工具，比开发单分散对应系统的工具更具挑战性 [49]。

通常，研究气固两相流会采用两种方法：欧拉-欧拉（EE）方法和欧拉-拉格朗日（EL）方法。在这两种方法中，气相均由纳维-斯托克斯（NS）方程描述，即所谓的欧拉方法；而固体颗粒相则可以采用欧拉方法或拉格朗日方法处理。在欧拉-欧拉（EE）方法中，颗粒相被建模为连续流体，并在模拟中使用流体动力学求解器 [9, 30, 12]。在欧拉-拉格朗日（EL）方法中，通过求解颗粒运动的牛顿方程，分别跟踪所有固体颗粒或颗粒包；其中，颗粒包代表一组具有相同属性的固体颗粒。同时，还会对固体颗粒之间的碰撞进行建模，例如离散元法（DEM） [37, 50] 以及多相粒子网格法（MP-PIC）[31, 32, 38]中的碰撞规则。通常，欧拉-拉格朗日（EL）方法在所有流动状态下均表现良好。尽管当固相的克努森数（Kn）较大时，欧拉-欧拉（EE）方法可能无法准确预测特定流动，但由于其计算效率高，该方法仍然是实际工程应用中的主流方法 [51, 49]。除上述方法外，颗粒流中常用的其他数值方法还包括但不限于矩方法（MOM） [21, 5], 蒙特卡罗直接模拟法（DSMC） [10],可压缩多相粒子网格法（CMP-PIC） [35], 以及混合欧拉-拉格朗日方法[28], 等。

对于固体颗粒演化，应对颗粒自由输运、与气相的相互作用以及颗粒间碰撞所产生的动力学过程进行建模 [21, 48]。对于多分散流，颗粒间碰撞包括单分散和多分散类型的粒子。对于EL方法，例如离散元法，由于所有固体颗粒的输运都会根据碰撞定律通过显式颗粒间碰撞进行跟踪，因此在模拟中可以直接加入多分散情况下对粒子的影响 [6, 50]。然而，计算成本很高，尤其是在克努森数较小时，因为需要跟踪数量极其庞大的粒子。对于欧拉-欧拉方法，多流体策略

是多分散流研究中最常采用的方法之一，其中采用多组控制方程来描述分散相 [22, 12, 27]。例如，在基于PSD研究流体动力学行为时，根据颗粒尺寸将颗粒相建模为不同的离散相 [27]。在多流体模型中，一个固相的闭合将涉及其他分散相的性质。其中一个重要因素是确定不同分散相之间动量交换中的固-固曳力 [34, 22, 5]。另一种方法是对整个固相采用一组控制方程，并在考虑不同颗粒尺寸的基础上加入额外修正 [2]。此外，在单分散/多分散颗粒流中，无论采用欧拉-欧拉方法还是EL方法，气固相互作用也发挥着重要作用。特别是，气流对固体颗粒的曳力对于准确预测气固系统的流场至关重要 [50, 16]。例如，通过比较不同的多分散阻力模型，评估其捕捉不同分散固相流动混合与偏析行为的性能 [50]。通常采用两种方法评估多分散系统中的阻力模型。第一种方法是直接将基于单分散流开发的阻力模型应用于各个分散相 [12, 5]。第二种方法是根据相互作用规则，将通过实验或DNS模拟获得的整个多分散系统的总曳力分配给各个分散相[1, 29]。能量最小化多尺度（EMMS）理论已针对气固流动得到系统发展 [15, 44, 40], ，并已扩展至多分散颗粒流系统，在欧拉-欧拉方法中表现出更优的流体动力学性能 [27]。

最近，针对气固两相流提出了一种多尺度GKS-UGKWP方法，该方法具有状态自适应性，并且在极限条件 [46, 47, 48]下可以恢复欧拉-欧拉方法和EL方法。颗粒相的统一气体动理学波粒方法（UGKWP）是统一气体动理学格式（UGKS）的波粒版本。UGKS是一种多尺度方法，它直接在单元尺寸和时间步的尺度上对流动物理过程进行建模，并根据单元的克努森数 [43, 42]对动力学进行建模。该方法最初为稀薄流开发，随后扩展到辐射输运、等离子体、颗粒流等领域 [33, 19, 18]。不同于UGKS方法以确定性方式同时更新宏观变量和微观分布，UGKWP方法通过解析波和统计颗粒更新分布函数，并采用与克努森数（Kn）相关的权重，例如波分量的$(1-\exp(-1/\mathrm{Kn}))$和颗粒分量的$\exp(-1/\mathrm{Kn})$。该方法大幅提高了高速高温流动模拟的计算效率，尤其是在接近平衡流动状态时 [20, 52]。在连续流状态下，UGKWP恢复为气体动理学格式（GKS） [41, 45, 42], ，后者是基于动理学理论的二阶NS求解器。GKS也用于求解气固系统中的气相。由于采用了依赖克努森数的波粒分解，UGKWP适用于颗粒流模拟。在小克努森数的高颗粒碰撞状态下，UKGWP中不会采样任何颗粒，因此固体颗粒相的演化将采用流体动力学形式。整个GKS-UGKWP方法恢复为欧拉-欧拉方法。相反，当克努森数较大时，例如固体颗粒相处于无碰撞状态，固相的演化将由追踪离散颗粒决定，

并且，GKS-UGKWP会自动返回到EL方法。在中等克努森数下，UGKWP将同时更新流体动力学波和微观离散颗粒，以捕捉局部非平衡颗粒流。本文首次将GKS- UGKWP扩展用于求解多分散气固流，其中气流中的颗粒输运以及同类型和不同类型颗粒之间的颗粒碰撞将被纳入该方法。

本文组织如下：第2节介绍颗粒相的控制方程和UGKWP方法。第3节介绍气相的控制方程和GKS方法。第4节展示数值算例以及结合实验测量的实际工程应用。最后一节为结论。

2. 用于分散固体颗粒相的 UGKWP

2.1. 分散相控制方程

分散相的演化由动力学方程控制，

$$\frac{\partial f_k}{\partial t}+\nabla_{\mathbf{x}}\cdot(\mathbf{u}f_k)+\nabla_{\mathbf{u}}\cdot(\mathbf{a}f_k)=\frac{g_k-f_k}{\tau_k}+\sum_{i=1,i\neq k}^{N}\frac{g_{ik}-f_k}{\tau_{ik}}, \tag{1}$$

其中， f_k 是第 $k-$个分散相的分布函数，$\mathbf{u}$ 是颗粒速度，$\mathbf{a}$ 是外力引起的颗粒加速度，$\nabla_{\mathbf{x}}$ 是相对于空间的散度算子， $\nabla_{\mathbf{u}}$ 是相对于速度的散度算子， τ_k 是第 $k-$个分散相的弛豫时间，而 g_k 是相关的平衡分布，可写为，

$$g_k=\epsilon_k\rho_k\left(\frac{\lambda_k}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\lambda_k\left[(\mathbf{u}-\mathbf{U}_k)^2\right]},$$

其中， ϵ_k 是第 $k-$个分散相的体积分数， ρ_k 是第 $k-$个分散相的材料密度， λ_k 是与颗粒温度 θ_k 相关的变量，其 $\lambda_k=1/(2\theta_k)$，$\mathbf{U}_k$ 是第 $k-$个分散相的宏观速度。右端第二项 $\left(g_{ik}-f_k\right)/\tau_{ik}$ 表示跨物种碰撞，其中 N 是固体分散相的数量， τ_{ik} 是辅助碰撞时间，g_{ik} 是辅助平衡分布，

$$g_{ik}=\epsilon_k\rho_k\left(\frac{\lambda_k}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\lambda_k\left[(\mathbf{u}-\mathbf{U}_{ik})^2\right]},$$

并且请注意，利用上述 g_{ik}可以自动满足跨物种碰撞的质量守恒。

颗粒加速度 $\mathbf{a}$ 由外力决定，例如阻力$\mathbf{D}$、浮力 $\mathbf{F}_b$和重力 $m_k\mathbf{G}$等。特别是，$\mathbf{D}$ 和$\mathbf{F}_b$ 是相间

力，表示气流施加在固体颗粒上的力。阻力的一般形式可通过阻力模型计算，

$$\mathbf{D} = \frac{m_k}{\tau_{st}} \left(\mathbf{U}_g - \mathbf{u} \right). \tag{2}$$

在数值模拟中，方程 (2) 中的 τ_{st} 将通过为固相选择的阻力模型进行封闭，该模型将在后文详细介绍。此外，考虑的另一种相互作用力是浮力，其可表示为，

$$\mathbf{F}_b = -\frac{m_k}{\rho_k} \nabla_{\mathbf{x}} p_g, \tag{3}$$

其中 p_g 是气相的压力。

2.2. UGKWP方法

本小节介绍了用于分散相演化的UGKWP。通常，在固相 Δt_s 的一个数值时间步内，采用分裂算子通过以下步骤求解 Eq.(1)，

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{d1}: \quad & \frac{\partial f_k}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u} f_k) = \frac{g_k - f_k}{\tau_k}, \\
\mathcal{L}_{d2}: \quad & \frac{\partial f_k}{\partial t} = \sum_{i=1, i \neq k}^{N} \frac{g_{ik} - f_k}{\tau_{ik}}, \\
\mathcal{L}_{d3}: \quad & \frac{\partial f_k}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{u}} \cdot (\mathbf{a} f_k) = 0.
\end{aligned}$$

为简洁起见，由 $\mathcal{L}_{d1}$、 $\mathcal{L}_{d2}$和 $\mathcal{L}_{d3}$ 更新的变量记为，

$$\mathcal{L}_{d1}: \mathbf{W}^n \to \mathbf{W}^*, \quad \mathcal{L}_{d2}: \mathbf{W}^* \to \mathbf{W}^{**}, \quad \mathcal{L}_{d3}: \mathbf{W}^{**} \to \mathbf{W}^{n+1}.$$

首先，我们聚焦于部分 $\mathcal{L}_{d1}: \mathbf{W}^n \to \mathbf{W}^*$。不考虑外力和固体颗粒跨物种碰撞的分散相动力学方程为

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u} f_k) = \frac{g_k - f_k}{\tau_k}.$$

为简洁起见，本小节中将省略下标 k。动力学方程的积分解可写为，

$$f(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}) = \frac{1}{\tau} \int_0^t g(\mathbf{x}', t', \mathbf{u}) e^{-(t-t')/\tau} \mathrm{d}t' + e^{-t/\tau} f_0(\mathbf{x} - \mathbf{u}t, \mathbf{u}), \tag{4}$$

其中，$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{u}(t' - t)$ 是粒子的轨迹， f_0 是时刻 $t = 0$ 的初始分布函数， g 是相应的平衡态。在 UGKWP 中，宏观守恒变量和微观分布函数都将在有限.....下更新。

体积框架。单元 i 的单元平均宏观变量 $\mathbf{W}_i$ 通过守恒律进行更新,

$$\mathbf{W}_i^* = \mathbf{W}_i^n - \frac{1}{\Omega_i} \sum_{S_{ij} \in \partial\Omega_i} \mathbf{F}_{ij} S_{ij} + \mathbf{S}_i \Delta t, \tag{5}$$

其中 $\mathbf{W}_i = (\epsilon_i \rho_i,\ \epsilon_i \rho_i \mathbf{U}_i,\ \epsilon_i \rho_i E_i)$ 是定义如下的单元平均宏观量,

$$\mathbf{W}_i = \frac{1}{\Omega_i} \int_{\Omega_i} \mathbf{W}(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\Omega,$$

$\epsilon_i \rho_i E_i = \frac{1}{2}\epsilon_i \rho_i \mathbf{U}_i^2 + \frac{3}{2}\epsilon_i \rho_i \theta_i$, Ω_i 是单元 i 的体积, $\partial\Omega_i$ 表示单元 i 的单元界面集合, S_{ij} 是单元 i 的第 j 个界面的面积, $\mathbf{F}_{ij}$ 表示$\mathbf{W}_i$ 通过界面 S_{ij} 的通量。一步 Δt 内的通量$\mathbf{F}_{ij}$ 可通过以下方式计算,

$$\mathbf{F}_{ij} = \int_0^{\Delta t} \int \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{ij} f_{ij}(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}) \boldsymbol{\psi} \mathrm{d}\mathbf{u} \mathrm{d}t, \tag{6}$$

其中$\mathbf{n}_{ij}$ 为界面 S_{ij}的单位法向量, $f_{ij}(t)$为界面 S_{ij}上的分布函数, 且 $\boldsymbol{\psi} = (1, \mathbf{u}, \frac{1}{2}\mathbf{u}^2)^T$。这里,

$$\mathbf{S}_i = \left[0, \mathbf{0}, -\frac{Q_{i,loss}}{\tau_k}\right]^T$$

表示固体颗粒非弹性碰撞所损失的能量,

$$Q_{i,loss} = \left(1 - e^2\right) \frac{3}{2} \epsilon_i \rho_i \theta_i,$$

其中, $e \in [0, 1]$ 是恢复系数, 用于确定非弹性碰撞中损失能量的百分比。

将时变分布函数 Eq.(4) 代入 Eq.(6), 通量可改写为,

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}_{ij} &= \int_0^{\Delta t} \int \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{ij} f_{ij}(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}) \boldsymbol{\psi} \mathrm{d}\mathbf{u} \mathrm{d}t \\
&= \int_0^{\Delta t} \int \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{ij} \left[\frac{1}{\tau} \int_0^t g(\mathbf{x}', t', \mathbf{u}) e^{-(t-t')/\tau} \mathrm{d}t'\right] \boldsymbol{\psi} \mathrm{d}\mathbf{u} \mathrm{d}t \\
&+ \int_0^{\Delta t} \int \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{ij} \left[e^{-t/\tau} f_0(\mathbf{x} - \mathbf{u}t, \mathbf{u})\right] \boldsymbol{\psi} \mathrm{d}\mathbf{u} \mathrm{d}t \\
&\overset{def}{=} \mathbf{F}_{ij}^{eq} + \mathbf{F}_{ij}^{fr}.
\end{aligned}$$

在单元界面处获得局部平衡态 g_0 的过程以及

构造 $g(t)$ 的方法与 GKS 中相同。为达到二阶精度，单元界面附近的平衡态 g 写作：

$$g\left(\mathbf{x}', t', \mathbf{u}\right) = g_0\left(\mathbf{x}, \mathbf{u}\right)\left(1 + \overline{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{u}\left(t' - t\right) + \bar{A}t'\right),$$

其中$\mathbf{a} = [\overline{a_1}, \overline{a_2}, \overline{a_3}]^T$、 $\overline{a_i} = \frac{\partial g}{\partial x_i}/g$、 $i = 1$、2、3、$\bar{A} = \frac{\partial g}{\partial t}/g$和 g_0是界面处的局部平衡态。具体而言，空间导数的系数a_i 可以由宏观变量的相应导数得到，

$$\langle \overline{a_i} \rangle = \partial \mathbf{W}_0 / \partial x_i,$$

其中 $i = 1$、2、3和 $\langle ... \rangle$ 表示麦克斯韦分布函数的矩，

$$\langle ... \rangle = \int \boldsymbol{\psi}\left(...\right) g \mathrm{d}\mathbf{u}.$$

时间导数的系数 A 可以通过相容性条件确定，

$$\left\langle \overline{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{u} + \overline{A} \right\rangle = \mathbf{0}.$$

现在，平衡态 g （$\mathbf{x}'$、t'、$\mathbf{u}$）中的所有系数都已确定，其积分为，

$$\begin{aligned} f^{eq}(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}) &\overset{def}{=} \frac{1}{\tau}\int_0^t g(\mathbf{x}', t', \mathbf{u}) e^{-(t-t')/\tau} \mathrm{d}t' \\ &= c_1 g_0\left(\mathbf{x}, \mathbf{u}\right) + c_2 \overline{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{u} g_0\left(\mathbf{x}, \mathbf{u}\right) + c_3 A g_0\left(\mathbf{x}, \mathbf{u}\right), \end{aligned} \tag{7}$$

其系数为，

$$\begin{aligned} c_1 &= 1 - e^{-t/\tau}, \\ c_2 &= \left(t + \tau\right) e^{-t/\tau} - \tau, \\ c_3 &= t - \tau + \tau e^{-t/\tau}. \end{aligned}$$

因此，来自平衡态$\mathbf{F}_{ij}^{eq}$ 的通量为

$$\mathbf{F}_{ij}^{eq} = \int_0^{\Delta t} \int \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{ij} f_{ij}^{eq}(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}) \boldsymbol{\psi} \mathrm{d}\mathbf{u} \mathrm{d}t.$$

此外，粒子自由输运产生的通量贡献通过追踪从 f_0中采样的粒子来计算。因此，单元平均宏观量的更新

变量可写为:

$$\mathbf{W}_i^* = \mathbf{W}_i^n - \frac{1}{\Omega_i} \sum_{S_{ij} \in \partial\Omega_i} \mathbf{F}_{ij}^{eq} S_{ij} + \frac{\mathbf{w}_i^{fr}}{\Omega_i} + \mathbf{S}_i \Delta t, \tag{8}$$

其中 $\mathbf{w}_i^{fr}$ 是单元 i 的净自由流动通量，通过统计采样粒子获得，表示粒子自由输运的通量贡献。

颗粒分布的演化可写为,

$$f(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}) = \left(1 - e^{-t/\tau}\right) g^+(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}) + e^{-t/\tau} f_0(\mathbf{x} - \mathbf{u}t, \mathbf{u}), \tag{9}$$

其中 g^+ 被称为具有解析表达式的流体力学分布函数。初始分布函数 f_0 以 $e^{-t/\tau}$ 的概率进行自由输运，并以$(1-e^{-t/\tau})$的概率与其他粒子发生碰撞。碰撞后的粒子满足分布$g^+(\mathbf{x},\mathbf{u}\ t)$。与其他粒子发生首次碰撞前的自由输运时间记为 t_c，则 t_c 的累积分布函数为,

$$F\left(t_c < t\right) = 1 - e^{-t/\tau}, \tag{10}$$

因此， t_c可以采样为 $t_c = -\tau \ln\left(\eta\right)$，其中 η是从均匀分布 $U\left(0,1\right)$中生成的随机数。然后，分别通过以下方式确定每个粒子的自由输运时间 t_f ,

$$t_f = min\left[-\tau \ln\left(\eta\right), \Delta t\right], \tag{11}$$

其中， Δt 是时间步。因此，在一个时间步内，所有粒子可分为两组：无碰撞粒子和碰撞粒子，它们由时间步 Δt 与自由输运时间 t_f之间的关系确定。具体而言，如果 $t_f = \Delta t$，则该粒子为无碰撞粒子，其轨迹将在整个时间步内被完整跟踪。相反，如果 $t_f < \Delta t$，则该粒子为碰撞粒子，其轨迹将被跟踪至 t_f。在模拟中，碰撞粒子将在 t_f 被消除，并且该粒子携带的相关质量、动量和能量将通过计算其穿过单元界面的通量贡献，合并到相关单元的宏观量中。更具体地说，自由输运过程中时间区间$t \in [0, t_f]$ 内的粒子轨迹由以下方式跟踪,

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{x}^n + \mathbf{u}^n t_f. \tag{12}$$

项$\mathbf{w}_i^{fr}$ 可以通过统计穿过单元 i各界面的粒子数来计算,

$$\mathbf{w}_i^{fr} = \sum_{k \in P\left(\partial\Omega_i^+\right)} \boldsymbol{\phi}_k - \sum_{k \in P\left(\partial\Omega_i^-\right)} \boldsymbol{\phi}_k, \tag{13}$$

其中， $P\left(\partial\Omega_i^+\right)$ 是在一个时间步内移入单元 i 的粒子集， $P\left(\partial\Omega_i^-\right)$是移出单元 i的粒子集， k 是特定粒子集中的粒子索引，且$\boldsymbol{\phi}_k = \left[m_k, m_k\mathbf{u}_k, \frac{1}{2}m_k(\mathbf{u}_k^2)\right]^T$是粒子 k携带的质量、动量和能量。因此，$\mathbf{w}_i^{fr}/\Omega_i$ 是由所追踪粒子的自由输运引起的净守恒量。现在，式（8）中的所有项均已确定，可以更新宏观变量 $\mathbf{W}_i$ 。

所有粒子均已追踪至时间 t_f。具有 $t_f = \Delta t$ 的无碰撞粒子将在时间步结束时存活；而具有 $t_f < \Delta t$ 的碰撞粒子将在首次碰撞后被删除，并假设其在该单元中达到平衡态。因此，每个时间步结束时，单元 i 中碰撞粒子的流体宏观变量可直接通过以下方式获得。

$$\mathbf{W}_i^h = \mathbf{W}_i^* - \mathbf{W}_i^p, \tag{14}$$

以及$\mathbf{W}_i^p$ 分别表示单元内剩余无碰撞粒子的质量、动量和能量。这里的宏观变量$\mathbf{W}_i^h$ 涵盖了所有被删除的碰撞粒子，这些粒子可以在下一个时间步开始时，根据麦克斯韦分布从 $\mathbf{W}_i^h$ 中重新采样。至此，宏观变量和微观粒子的更新方法均已介绍。上述方法称为统一气体动理学粒子（UGKP）方法。

上述UGKP还可以进一步更新为UGKWP方法。在UGKP方法中，每个时间步内所有粒子都被分为无碰撞粒子和碰撞粒子。碰撞粒子在首次碰撞后被删除，并在下一个时间步开始时从$\mathbf{W}_i^h$ 重新采样。然而，重新采样粒子中只有无碰撞部分能够在下一个时间步中存活，所有重新采样的碰撞粒子都会再次被删除。幸运的是，这些碰撞粒子产生的输运通量可以在不使用粒子的情况下进行解析评估。因此，我们根本不需要从$\mathbf{W}_i^h$ 重新采样这些碰撞粒子。根据累积分布Eq.(10)，无碰撞粒子的比例为 $e^{-\Delta t/\tau}$，因此在UGKWP中，只有来自单元 i 内流体变量$\mathbf{W}_i^h$ 的无碰撞粒子会携带总质量、动量和能量重新采样，

$$\mathbf{W}_i^{hp} = e^{-\Delta t/\tau}\mathbf{W}_i^h. \tag{15}$$

随后，在UGKWP 中，所有这些重新采样粒子的自由输运时间将由 $t_f = \Delta t$ 给出。来自这些未采样碰撞粒子的通量 $\mathbf{F}^{fr,wave}$可由 $(1-e^{-\Delta t/\tau})\mathbf{W}_i^h$解析求得 [20, 52]。现在，与 UGKP 相同，在 UGKWP 中，由粒子的自由输运产生的净通量 $\mathbf{w}^{fr,i}{}^p$可通过计算得到，其中的粒子包括来自上一个时间步的剩余粒子和重新采样的无碰撞粒子，具体为

$$\mathbf{w}_i^{fr,p} = \sum_{k\in P\left(\partial\Omega_i^+\right)} \boldsymbol{\phi}_k - \sum_{k\in P\left(\partial\Omega_i^-\right)} \boldsymbol{\phi}_k. \tag{16}$$

因此，UGKWP 中的宏观流动变量通过

$$\mathbf{W}_i^* = \mathbf{W}_i^n - \frac{1}{\Omega_i}\sum_{S_{ij}\in\partial\Omega_i}\mathbf{F}_{ij}^{eq}S_{ij} - \frac{1}{\Omega_i}\sum_{S_{ij}\in\partial\Omega_i}\mathbf{F}_{ij}^{fr,wave}S_{ij} + \frac{\mathbf{w}_i^{fr,p}}{\Omega_i} + \mathbf{S}_i\Delta t, \tag{17}$$

其中，$\mathbf{F}^{fr}{}_{,ij}^{\ wave}$ 是未采样碰撞粒子 [20, 52], 的通量函数

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}_{ij}^{fr,wave} &= \mathbf{F}_{ij}^{fr,UGKS}(\mathbf{W}_i^h) - \mathbf{F}_{ij}^{fr,DVM}(\mathbf{W}_i^{hp}) \\
&= \int_0^{\Delta t}\int \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}_{ij}\left[e^{-t/\tau}f_0(\mathbf{x}-\mathbf{u}t,\mathbf{u})\right]\boldsymbol{\psi}\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}t \\
&- e^{-\Delta t/\tau}\int_0^{\Delta t}\int \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}_{ij}\left[g_0^h(\mathbf{x},\mathbf{u}) - t\mathbf{u}\cdot g_{\mathbf{x}}^h(\mathbf{x},\mathbf{u})\right]\boldsymbol{\psi}\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}t \\
&= \int \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}_{ij}\left[\left(q_4 - \Delta t e^{-\Delta t/\tau}\right)g_0^h(\mathbf{x},\mathbf{u}) + \left(q_5 + \frac{\Delta t^2}{2}e^{-\Delta t/\tau}\right)\mathbf{u}\cdot g_{\mathbf{x}}^h(\mathbf{x},\mathbf{u})\right]\boldsymbol{\psi}\mathrm{d}\mathbf{u},
\end{aligned}$$

其中，

$$\begin{aligned}
q_4 &= \tau\left(1-e^{-\Delta t/\tau}\right), \\
q_5 &= \tau\Delta t e^{-\Delta t/\tau} - \tau^2\left(1-e^{-\Delta t/\tau}\right).
\end{aligned}$$

在第二部分 $\mathcal{L}_{d2}$ 中，$\mathbf{W}^* \rightarrow \mathbf{W}^{**}$ 描述不同分散相中的固体颗粒之间跨物种碰撞的影响。以第 $k-$ 个分散相为例，其与其他分散相的碰撞可通过以下公式计算:

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} = \sum_{i=1,i\neq k}^{N}\frac{g_{ik}-f_k}{\tau_{ik}}.$$

显然，$\epsilon_k^{**} = \epsilon_k^*$ 与上述 g_{ik} 公式一致。在欧拉区间内，取 $f_k = g_k + \mathcal{O}(\tau_k)$ 的矩 $\boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{u}$，可得:

$$\frac{\partial\left(\epsilon_k\rho_k\mathbf{U}_k\right)}{\partial t} = \sum_{i=1,i\neq k}^{N}\frac{\epsilon_k\rho_k\left(\mathbf{U}_{ik}-\mathbf{U}_k\right)}{\tau_{ik}}. \tag{18}$$

本文假设第 $i-$ 个与第 $k-$ 个分散相之间的辅助速度 $\mathbf{U}_{ik}$ 为:

$$\mathbf{U}_{ik} = \frac{\epsilon_i\rho_i\mathbf{U}_i + \epsilon_k\rho_k\mathbf{U}_k}{\epsilon_i\rho_i + \epsilon_k\rho_k}. \tag{19}$$

现在我们需要确定 τ_{ik}，即第 $i-$个与第 $k-$个分散相之间的碰撞时间。通常，多分散颗粒流中常用的参数是β_{ik}，它被称为所谓的固体间阻力模型，并具有以下关系

与 τ_{ik} 搭配,

$$\frac{\epsilon_k \rho_k \left(\mathbf{U}_{ik} - \mathbf{U}_k\right)}{\tau_{ik}} = \beta_{ik} \left(\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_k\right). \tag{20}$$

这里$\mathbf{U}_k^{**}$ 可通过解析解获得,

$$\mathbf{U}_k^{**} = \left(1 - e^{-\frac{\Delta t_s}{\beta_{ik}/\epsilon_k^* \rho_k}}\right) \mathbf{U}_i^* + e^{-\frac{\Delta t_s}{\beta_{ik}/\epsilon_k^* \rho_k}} \mathbf{U}_k^*. \tag{21}$$

参数 β_{ik} 反映了不同分散固相之间的动量和能量交换，这在多分散固体颗粒流中起着重要作用。已有许多关于 β_{ik} [34, 22, 5]的研究。本文将采用 Mathiesen 基于 KTGF 提出的固相间阻力模型 [22],

$$\begin{aligned}\beta_{ik} = & \frac{3 p_{c,ik}}{d_{ik}} \left[\frac{2\left(m_k^2 \theta_k + m_i^2 \theta_i\right)}{\pi m_0^2 \theta_k \theta_i}\right]^{1/2} \\ & + \frac{p_{c,ik}}{|\mathbf{U}_k - \mathbf{U}_i|} \left[\nabla_x \ln \frac{\epsilon_k}{\epsilon_i} + 3 \nabla_x \frac{\ln\left(m_i \theta_i\right)}{\ln\left(m_k \theta_k\right)} + \frac{\theta_k \theta_i}{\theta_k + \theta_i} \left(\frac{\nabla_x \theta_k}{\theta_k^2} - \frac{\nabla_x \theta_i}{\theta_i^2}\right)\right],\end{aligned}$$

其中 $p_{c,ik}$ 是第 $i-$ 个与第 $k-$ 个分散相之间的碰撞压力,

$$p_{c,ik} = \frac{\pi\left(1 + e_{ik}\right) d_{ik}^3 g_{ik} \epsilon_i \rho_i \epsilon_k \rho_k \theta_i \theta_k \left(m_i + m_k\right)}{3\left(m_i^2 \theta_i + m_k^2 \theta_k\right)} \left[\frac{\left(m_i + m_k\right)^2 \theta_i \theta_k}{\left(m_i^2 \theta_i + m_k^2 \theta_k\right)\left(\theta_i + \theta_k\right)}\right]^{3/2}, \tag{22}$$

其中,

$$\begin{aligned} m_0 = m_i + m_k,\ m_k = \frac{\pi}{6} \rho_k d_k^3,\ m_i = \frac{\pi}{6} \rho_i d_i^3, \\ e_{ik} = \frac{e_i + e_k}{2},\ d_{ik} = \frac{d_i + d_k}{2}, g_{ik} = \frac{N}{2} \frac{\epsilon_i + \epsilon_k}{1 - \epsilon_g} g_0. \end{aligned}$$

本文忽略交叉碰撞项对颗粒温度的影响，这意味着 $\theta_k^{**} = \theta_{k^\circ}^*$

最后，第三部分 $\mathcal{L}_{d3}$ 中，$\mathbf{W}^{**} \rightarrow \mathbf{W}^{n+1}$ 表示加速度,

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{u}} \cdot \left(\mathbf{a} f_k\right) = 0,$$

其中，单个固体颗粒$\mathbf{a}$ 的加速度可分解为三部分,

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}_D + \mathbf{a}_c + \mathbf{a}_p,$$

其中$\mathbf{a}_D$是气固相互作用产生的与速度相关的阻力，

$$\mathbf{a}_D = \frac{\mathbf{U}_g - \mathbf{u}}{\tau_{st,k}},$$

$\mathbf{a}_c$是作用于固体颗粒的与速度无关的浮力和重力 e,

$$\mathbf{a}_c = -\frac{1}{\rho_k}\nabla_{\mathbf{x}} p_g + \mathbf{G}.$$

且$\mathbf{a}_p$是固相之间碰撞压力和摩擦压力产生的力。如下文所示，$\mathbf{a}_p$主要作用于致密颗粒流，其性质类似于法向应力。在 MP-PIC 方法中，该项会根据条件进行更新 [31, 38, 32]。

对 $\mathcal{L}_{d3}$ 方程取矩 $\boldsymbol{\psi}$，在满足 $f_k = g_k + \mathcal{O}(\tau_k)$ 的欧拉体系下，可得

$$\frac{\partial \mathbf{W}_k}{\partial t} = \mathbf{Q}_k, \tag{23}$$

其中

$$\mathbf{Q}_k = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{\epsilon_k \rho_k (\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_k)}{\tau_{st,k}} + \epsilon_k \rho_k \left(\mathbf{a}_c + \mathbf{a}_p\right) \\ \frac{\epsilon_k \rho_k \mathbf{U}_k \cdot (\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_k)}{\tau_{st,k}} - 3\frac{\epsilon_k \rho_k \theta_k}{\tau_{st,k}} + \epsilon_k \rho_k \mathbf{U}_k \cdot \left(\mathbf{a}_c + \mathbf{a}_p\right) \end{bmatrix}.$$

此处，式（23）将在下文更新。首先，第 $k-$ 个分散相与气流之间的气固曳力

$$\begin{cases} \frac{\partial (\epsilon_k \rho_k \mathbf{U}_k)}{\partial t} = \beta_k \left(\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_k\right), \\ \frac{\partial (\tilde{\epsilon_g} \mathbf{U}_g)}{\partial t} = -\beta_k \left(\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_k\right), \end{cases}$$

采用隐式离散，

$$\begin{cases} \frac{\epsilon_k^{n+1} \rho_k \mathbf{U}_k^{***} - \epsilon_k^{**} \rho_k \mathbf{U}_k^{**}}{\Delta t_s} = \beta_k^{**} \left(\mathbf{U}_g^{***} - \mathbf{U}_k^{***}\right), \\ \frac{\tilde{\epsilon_g}^{n+1} \mathbf{U}_g^{***} - \tilde{\epsilon_g}^{**} \mathbf{U}_g^{**}}{\Delta t_s} = -\beta_k^{**} \left(\mathbf{U}_g^{***} - \mathbf{U}_k^{***}\right), \end{cases}$$

其中，$\beta_k = \frac{\epsilon_k \rho_k}{\tau_{st,k}}$，是根据第 $k-$ 个分散相的阻力模型确定的。显然，我们有 $\epsilon_k^{n+1} = \epsilon_k^{**}$、$\tilde{\epsilon_g}^{n+1} = \tilde{\epsilon_g}^{**}$，因此可得

$$\begin{cases} \mathbf{U}_k^{***} = \frac{\mathbf{U}_g^{**} \Delta t_s + \mathbf{U}_k^{**} r \Delta t_s + \mathbf{U}_k^{**} \tau_{st,k}}{\Delta t_s + r \Delta t_s + \tau_{st,k}}, \\ \mathbf{U}_g^{***} = \frac{\mathbf{U}_g^{**} \Delta t_s + \mathbf{U}_k^{**} r \Delta t_s + \mathbf{U}_g^{**} \tau_{st,k}}{\Delta t_s + r \Delta t_s + \tau_{st,k}}, \end{cases}$$

其中 $r=\frac{\epsilon_k^{**}\rho_k}{\tilde{\epsilon_g}^{**}}$。那么，颗粒所受阻力产生的加速度可写为:

$$\mathbf{a}_D^{***} \overset{def}{=} \frac{\mathbf{U}_g^{***}-\mathbf{U}_s^{***}}{\tau_{st,k}} = \frac{\mathbf{U}_g^{**}-\mathbf{U}_s^{**}}{\Delta t_s + r\Delta t_s + \tau_{st,k}},$$

以及不含$\mathbf{a}^p$ 的加速度可表示为,

$$\mathbf{a}^{***} = \mathbf{a}_D^{***} + \mathbf{a}_c = \frac{\mathbf{U}_g^{**}-\mathbf{U}_s^{**}}{\Delta t_s + r\Delta t_s + \tau_{st,k}} + \mathbf{a}_c.$$

其中，第 $k-$固相的宏观变量通过

$$\begin{cases} \epsilon_k^{n+1}\rho_k\mathbf{U}_k^{***} = \epsilon_k^{**}\rho_k\mathbf{U}_k^{**} + \epsilon_k^{**}\rho_k\mathbf{a}^{***}\Delta t_s, \\ \epsilon_k^{n+1}\rho_k E_k^{***} = \epsilon_k^{**}\rho_k E_k^{**} + \left(\epsilon_k^{**}\rho_k\mathbf{U}_k^{**}\cdot\mathbf{a}^{***} - 3\frac{\epsilon_k^{**}\rho_k\theta_k^{**}}{\tau_{st,k}}\right)\Delta t_s, \end{cases}$$

其中$\epsilon_k^{n+1}\rho_k E_k^{***} = \frac{1}{2}\epsilon_{\overline{k}}^{n+1}\rho_k\mathbf{U}_k^2 + \frac{3}{2}\epsilon_{\overline{k}}^{n+1}\rho_k\theta_k^{***}$。

如同对 MP-PIC方法的处理，$\mathbf{a}^p$ 最终更新为 [31, 32],

$$\mathbf{a}_p = -\frac{1}{\epsilon_k\rho_k}\nabla_{\mathbf{x}}\left(p_{k,c}+p_{k,f}\right), \tag{24}$$

其中$p_{k,c}$ 和$p_{k,f}$ 是第 $k-$ 个分散相的碰撞压力和摩擦压力，分别由式（31）和式（32）确定。在本文中，由式（24）得到的 $\mathbf{a}^p$ 还受到以下稳定性条件的约束,

$$\begin{cases} \left|\frac{1}{2}\mathbf{a}_p\Delta t_s^2\right| \le k_c\Delta_{cell}, \\ \left|\mathbf{U}_k^{***}\Delta t_s + \frac{1}{2}\mathbf{a}_p\Delta t_s^2\right| \le k_c\Delta_{cell}, \end{cases}$$

其中， Δ_{cell} 是单元尺寸， k_c 是一个小于 1 的安全系数，例如本文中使用的 0。8。现在可以完全确定加速度:

$$\mathbf{a}^{n+1} = \mathbf{a}^{***} + \mathbf{a}_p.$$

第 $k-$ 个固相$\mathbf{U}_k^{n+1}$ 的宏观速度更新为

$$\mathbf{U}_k^{n+1} = \mathbf{U}_k^{***} + \mathbf{a}_p\Delta t_s,$$

其中颗粒温度为 $\theta_k^{n+1} = \theta_k^{***}$。

此外，更新其余自由输运粒子的速度和位置如下:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* + \mathbf{a}^{n+1}t_f, \tag{25}$$

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^* + \frac{1}{2}\mathbf{a}^{n+1}t_f^2. \tag{26}$$

上述过程用于在一个时间步 Δt_s内更新分散颗粒相。

2.3. 固体颗粒相的克努森数和流动状态

克努森数$_k$ 表示第 k–个分散颗粒相的克努森数，其定义为碰撞时间 τ_k 与宏观流动特征时间尺度 t_{ref}之比，

$$\mathrm{Kn}_k = \frac{\tau_k}{t_{ref}}. \tag{27}$$

特征时间 t_{ref} 取固相的时间步 Δt_s，而 τ_k 是固体颗粒碰撞的时间间隔。本文中，τ_k 定义为 [26, 21]，

$$\tau_k = \frac{\sqrt{\pi} d_k}{12 \epsilon_k g_0 \sqrt{\theta_k}}, \tag{28}$$

其中，d_k、ϵ_k和 θ_k 分别是第 k–个分散相的固体颗粒直径、体积分数和颗粒温度。g_0 是径向分布函数，其形式如下，

$$g_0 = \frac{2 - c}{2 \left(1 - c\right)^3}, \tag{29}$$

其中，$c = \epsilon_t / \epsilon_{s,\ max}$ 是多分散固体混合物的总固相体积分数 ϵ_t 与允许最大值$\epsilon_{s,\ max}$ 之比。第 k–个分散相的流动状态由克努森数 Kn_k决定。通常，在稀相流动中，固体颗粒之间的碰撞频率较低，因此克努森数 Kn_k较大，UGKWP会对固体颗粒进行采样和跟踪，并自动保持非平衡状态。相反，在高浓度区域，颗粒间的高碰撞频率使固相处于平衡态，因此UGKWP不会对颗粒进行采样。在连续流动状态的极限情形下，当 $e = 1$时，上述用于方程(1)的UGKWP方法可以恢复以下流体力学方程的解，

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \left(\epsilon_k \rho_k\right)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\epsilon_k \rho_k \mathbf{U}_k\right) &= 0, \\
\frac{\partial \left(\epsilon_k \rho_k \mathbf{U}_k\right)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\epsilon_k \rho_k \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k + p_k \mathbb{I}\right) &= \frac{\epsilon_k \rho_k \left(\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_k\right)}{\tau_{st,k}} \\
&\quad - \epsilon_k \nabla_{\mathbf{x}} p_g + \epsilon_k \rho_k \mathbf{G} + \sum_{i=1, i \neq k}^{N} \beta_{ik} \left(\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_k\right), \\
\frac{\partial \left(\epsilon_k \rho_k E_k\right)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\left(\epsilon_k \rho_k E_k + p_{k,k}\right) \mathbf{U}_k\right) &= \frac{\epsilon_k \rho_k \mathbf{U}_k \cdot \left(\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_k\right)}{\tau_{st,k}} \\
&\quad - 3 \frac{\epsilon_k \rho_k \theta_k}{\tau_{st,k}} - \epsilon_k \mathbf{U}_k \cdot \nabla_{\mathbf{x}} p_g + \epsilon_k \rho_k \mathbf{U}_k \cdot \mathbf{G}.
\end{aligned} \tag{30}$$

在方程(30)中，p_k 是第 k–个分散固相的压力，它由动理学压力$p_{k,\ k} = \epsilon_k \rho_k \theta_k$、碰撞压力$p_{k,\ c}$和摩擦压力$p_{k,\ f}$组成。针对$p_{k,\ c}$ 和$p_{k,\ f}$，已有大量研究，尤其是针对致密颗粒流 [4]。本文中，碰撞压力$p_{k,\ c}$ 按以下方式计算，

$$p_{c,k} = \sum_{i=1, i\neq k}^{N} p_{c,ik}, \tag{31}$$

其中，$p_{c,\ ik}$ 是第 i–相与第 k–相之间的碰撞压力，其表达式见式（22）。$p_{f,\ k}$ 表示第k–分散相中持续的颗粒间接触和摩擦作用，当固相接近密堆积时，该项起着重要作用。本文采用 Johnson-Jackson 模型 [14, 11],

$$p_{f,k} = \begin{cases} 0 & , \ \epsilon_t \leq \epsilon_{s,crit}, \\ 0.1\epsilon_k \dfrac{\left(\epsilon_t - \epsilon_{s,crit}\right)^2}{\left(\epsilon_{s,max} - \epsilon_t\right)^5} & , \ \epsilon_t > \epsilon_{s,crit}. \end{cases} \tag{32}$$

此处$\epsilon_{s,crit}$ 是整个固相的临界体积分数。为避免固相体积分数 ϵ_k 超过其最大值$\epsilon_{s,max}$，即避免过度堆积问题，在UGKWP方法的固相 [47]中采用了所提出的接近堆积条件的通量限制模型。

3. 气相的 GKS

3.1. 气相的控制方程

气相被视为连续流动，其控制方程为带有反映相间作用源项的纳维-斯托克斯方程 [9, 13],

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\left(\widetilde{\rho}_g\right)}{\partial t} + \nabla_x \cdot \left(\widetilde{\rho}_g \mathbf{U}_g\right) = 0, \\
&\frac{\partial\left(\widetilde{\rho}_g \mathbf{U}_g\right)}{\partial t} + \nabla_x \cdot \left(\widetilde{\rho}_g \mathbf{U}_g \mathbf{U}_g + \widetilde{p}_g \mathbb{I}\right) - \epsilon_g \nabla_x \cdot \left(\mu_g \boldsymbol{\sigma}\right) = p_g \nabla_x \epsilon_g - \sum_{k=1}^{N} \frac{\epsilon_k \rho_k \left(\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_k\right)}{\tau_{st}} + \rho_g \mathbf{G}, \\
&\frac{\partial\left(\widetilde{\rho}_g E_g\right)}{\partial t} + \nabla_x \cdot \left(\left(\widetilde{\rho}_g E_g + \widetilde{p}_g\right) \mathbf{U}_g\right) - \epsilon_g \nabla_x \cdot \left(\mu_g \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{U}_g - \kappa \nabla_x T_g\right) = \\
&\qquad\qquad - p_g \frac{\partial \epsilon_g}{\partial t} - \sum_{k=1}^{N} \frac{\epsilon_k \rho_k \mathbf{U}_k \cdot \left(\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_k\right)}{\tau_{st}} + \sum_{k=1}^{N} \frac{3\epsilon_k \rho_k \theta_k}{\tau_{st}} + \rho_g \mathbf{U}_g \cdot \mathbf{G},
\end{aligned} \tag{33}$$

其中， $\widetilde{\rho_g} = \epsilon_g \rho_g$ 是气相的表观密度， $p_g = \rho_g R T_g$ 是气相压力， $\widetilde{p_g} = \widetilde{\rho_g} R T_g$。应变率张量 $\boldsymbol{\sigma}$ 是

$$\boldsymbol{\sigma} = \nabla_x \mathbf{U}_g + (\nabla_x \mathbf{U}_g)^T - \frac{2}{3} \nabla_x \cdot \mathbf{U}_g \mathbb{I},$$

and

$$\mu_g = \tau_g p_g, \quad \kappa = \frac{5}{2} R \tau_g p_g.$$

特别是，在公式（33）的右侧，项 $p_g \nabla_x \epsilon_g$ 称为“喷管”项，与之相关的功项 $-p_g \frac{\partial \epsilon_g}{\partial t}$ 称为 pDV 功项，因为它类似于准一维气体喷管流动方程 [11]中的 pDV 项。如果“喷管”项和 pDV 项未能正确求解，可能会出现非物理的压力波动。根据 [36]，公式（33）可写成如下形式，

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial (\rho_g)}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho_g \mathbf{U}_g) = C_{\epsilon_g} \rho_g, \\
&\frac{\partial (\rho_g \mathbf{U}_g)}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho_g \mathbf{U}_g \mathbf{U}_g + p_g \mathbb{I} - \mu_g \boldsymbol{\sigma}) = C_{\epsilon_g} \rho_g \mathbf{U}_g - \sum_{k=1}^{N} \frac{\epsilon_k \rho_k (\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_k)}{\epsilon_g \tau_{st}} + \frac{\rho_g \mathbf{G}}{\epsilon_g}, \qquad (34) \\
&\frac{\partial (\rho_g E_g)}{\partial t} + \nabla_x \cdot ((\rho_g E_g + p_g) \mathbf{U}_g - \mu_g \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{U}_g + \kappa \nabla_x T_g) = \\
&\qquad C_{\epsilon_g} (\rho_g E_g + p_g) - \sum_{k=1}^{N} \frac{\epsilon_k \rho_k \mathbf{U}_k \cdot (\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_k)}{\epsilon_g \tau_{st}} + \sum_{k=1}^{N} \frac{3 \epsilon_k \rho_k \theta_k}{\epsilon_g \tau_{st}} + \frac{\rho_g \mathbf{U}_g \cdot \mathbf{G}}{\epsilon_g},
\end{aligned}$$

其中， $C_{\epsilon_g} = \frac{1}{\epsilon_g} \frac{\mathrm{d}\epsilon_g}{\mathrm{d}t}$，其中 $\frac{\mathrm{d}\epsilon_g}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \epsilon_g}{\partial t} + \mathbf{U}_g \cdot \nabla \epsilon_g$。求解 C_{ϵ_g} 的方法将在后文介绍。

3.2. 气体演化的*GKS*

气流由包含相间作用的纳维-斯托克斯方程描述，其解将通过相应的气体动理学格式（GKS）求得；该格式是 UGKWP 在连续介质区间的极限格式。一般而言，气相的演化

公式（34）在一个时间步 Δt_g 内可分为三部分，

$$\mathcal{L}_{g1}: \quad \begin{cases} \frac{\partial(\rho_g)}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho_g \mathbf{U}_g) = 0, \\ \frac{\partial(\rho_g \mathbf{U}_g)}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho_g \mathbf{U}_g \mathbf{U}_g + p_g \mathbb{I} - \mu_g \boldsymbol{\sigma}) = 0, \\ \frac{\partial(\rho_g E_g)}{\partial t} + \nabla_x \cdot ((\rho_g E_g + p_g)\, \mathbf{U}_g - \mu_g \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{U}_g + \kappa \nabla_x T_g) = 0, \end{cases} \tag{35}$$

$$\mathcal{L}_{g2}: \quad \begin{cases} \frac{\partial(\rho_g)}{\partial t} = C_{\epsilon_g} \rho_g, \\ \frac{\partial(\rho_g \mathbf{U}_g)}{\partial t} = C_{\epsilon_g} \rho_g \mathbf{U}_g, \\ \frac{\partial(\rho_g E_g)}{\partial t} = C_{\epsilon_g} (\rho_g E_g + p_g)\,. \end{cases} \tag{36}$$

$$\mathcal{L}_{g3}: \quad \begin{cases} \frac{\partial(\rho_g)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial(\rho_g \mathbf{U}_g)}{\partial t} = -\frac{\epsilon_s \rho_s (\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_s)}{\epsilon_g \tau_{st}} + \frac{\rho_g \mathbf{G}}{\epsilon_g}, \\ \frac{\partial(\rho_g E_g)}{\partial t} = -\frac{\epsilon_s \rho_s \mathbf{U}_s \cdot (\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_s)}{\epsilon_g \tau_{st}} + \frac{3\epsilon_k \rho_k \theta_k}{\epsilon_g \tau_{st}} + \frac{\rho_g \mathbf{U}_g \cdot \mathbf{G}}{\epsilon_g}. \end{cases} \tag{37}$$

由 $\mathcal{L}_{g1}$、 $\mathcal{L}_{g2}$ 和 $\mathcal{L}_{g3}$ 更新的变量记为：

$$\mathcal{L}_{g1}: \mathbf{W}^n \to \mathbf{W}^*, \quad \mathcal{L}_{g2}: \mathbf{W}^* \to \mathbf{W}^{**}, \quad \mathcal{L}_{g3}: \mathbf{W}^{**} \to \mathbf{W}^{n+1}.$$

首先，气相中不考虑喷嘴和加速项 $\mathcal{L}_{g1}$ 的动力学方程建模为：$\mathbf{W}^n \to \mathbf{W}^*$

$$\frac{\partial f_g}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\mathbf{u} f_g) = \frac{g_g - f_g}{\tau_g}, \tag{38}$$

其中，$\mathbf{u}$ 为速度，τ_g 为气相的弛豫时间，f_g 为气相的分布函数，g_g 为相应的平衡态（麦克斯韦分布）。局部平衡态 g_g 可写为：

$$g_g = \rho_g \left(\frac{\lambda_g}{\pi}\right)^{\frac{K+3}{2}} e^{-\lambda_g \left[(\mathbf{u}-\mathbf{U}_g)^2 + \boldsymbol{\xi}^2\right]},$$

其中，ρ_g 为密度，λ_g 由气体温度通过 $\lambda_g = \frac{m_g}{2k_B T_g}$ 确定，m_g 为分子质量，~~$\mathbf{U}_g$~~ 为气相的宏观速度。这里，K 为内自由度；对于三维双原子气体，$K = (5 - 3\gamma)/(\gamma - 1)$，其中 $\gamma = 1.4$ 为比热比。碰撞项满足相容性条件

$$\int \frac{g_g - f_g}{\tau_g} \boldsymbol{\psi} \mathrm{d}\Xi = 0, \tag{39}$$

其中 $\boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} 1, \mathbf{u}, \frac{1}{2}(\mathbf{u}^2 + \boldsymbol{\xi}^2) \end{pmatrix}^T$，内部变量 $\boldsymbol{\xi}^2 = \xi_1^2 + ... + \xi_K^2$，以及 $\mathrm{d}\Xi = \mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}\boldsymbol{\xi}$。

为简洁起见，本小节中将省略下标 g。对于式 (38)， f 在单元界面处的积分解可写为，

$$f(\mathbf{x},t,\mathbf{u},\boldsymbol{\xi})=\frac{1}{\tau}\int_0^t g(\mathbf{x}',t',\mathbf{u},\boldsymbol{\xi})e^{-(t-t')/\tau}\mathrm{d}t'+e^{-t/\tau}f_0(\mathbf{x}-\mathbf{u}t,\mathbf{u},\boldsymbol{\xi}), \tag{40}$$

其中，$\mathbf{x}'=\mathbf{x}+\mathbf{u}(t'-t)$表示粒子的轨迹， f_0 是时间 $t=0$的初始气体分布函数， g 是相应的平衡态。式（40）中的初始NS气体分布函数 f_0 可构造为

$$f_0=f_0^l(\mathbf{x},\mathbf{u})(1-H(x))+f_0^r(\mathbf{x},\mathbf{u})H(x), \tag{41}$$

其中， $H(x)$ 是 Heaviside 函数， f_0^l 和 f_0^r 分别是单元界面左侧和右侧的初始气体分布函数。更具体地说，初始气体分布函数 f_0^k, $k=l,\ r$，构造如下。

$$f_0^k=g^k\left(1+\mathbf{a}^k\cdot\mathbf{x}-\tau(\mathbf{a}^k\cdot\mathbf{u}+A^k)\right),$$

其中， g^l 和 g^r 是单元界面左侧和右侧的麦克斯韦分布函数，可由宏观守恒流变量$\mathbf{W}^l$ 和 $\mathbf{W}^r$完全确定。系数$\mathbf{a}^l=\left[a_1^l,a_2^l,a_3^l\right]^T$ 和$\mathbf{a}^r=[a_1^r,a_2^r,a_3^r]^T$ 与法向和切向的空间导数有关，这些导数可由初始宏观变量的相应导数计算得到，

$$\left\langle a_i^l\right\rangle=\partial\mathbf{W}^l/\partial x_i,\langle a_i^r\rangle=\partial\mathbf{W}^r/\partial x_i,$$

其中 $i=1$，2，3，且 $\langle\ldots\rangle$ 表示麦克斯韦分布函数的矩，

$$\langle\ldots\rangle=\int\boldsymbol{\psi}\left(\ldots\right)g\mathrm{d}\Xi.$$

基于 Chapman-Enskog 展开，分布函数的非平衡部分满足，

$$\left\langle\mathbf{a}^l\cdot\mathbf{u}+A^l\right\rangle=0,\ \left\langle\mathbf{a}^r\cdot\mathbf{u}+A^r\right\rangle=0,$$

因此，系数 A^l 和 A^r 可以完全确定。单元界面周围的平衡态 g建模为，

$$g=g_0\left(1+\bar{\mathbf{a}}\cdot\mathbf{x}+\bar{A}t\right), \tag{42}$$

其中 $\mathbf{a}^-=[\bar{a}_1,\bar{a}_2,\bar{a}_3]^T$, g_0是单元界面的局部平衡态。更具体地说， g

可由相容性条件确定,

$$\int \boldsymbol{\psi} g_0 \mathrm{d}\Xi = \mathbf{W}_0 = \int_{u>0} \boldsymbol{\psi} g^l \mathrm{d}\Xi + \int_{u<0} \boldsymbol{\psi} g^r \mathrm{d}\Xi,$$
$$\int \boldsymbol{\psi} \overline{a_i} g_0 \mathrm{d}\Xi = \partial \mathbf{W}_0 / \partial x_i = \int_{u>0} \boldsymbol{\psi} a_i^l g^l \mathrm{d}\Xi + \int_{u<0} \boldsymbol{\psi} a_i^r g^r \mathrm{d}\Xi,$$

$i = 1$，2，3 和

$$\left\langle \overline{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{u} + \bar{A} \right\rangle = 0.$$

确定初始气体分布函数 f_0 和局部平衡态 g中的所有参数后，将式（41）和式（42）代入式（40），单元界面处的时变分布函数 $f(\mathbf{x}\ t,\ \mathbf{u}\ \boldsymbol{\xi})$可表示为:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}, \boldsymbol{\xi}) = & c_1 g_0 + c_2 \overline{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{u} g_0 + c_3 \bar{A} g_0 \\ & + \left[c_4 g^r + c_5 \mathbf{a}^r \cdot \mathbf{u} g^r + c_6 A^r g^r \right] (1 - H(u)) \\ & + \left[c_4 g^l + c_5 \mathbf{a}^l \cdot \mathbf{u} g^l + c_6 A^l g^l \right] H(u). \end{aligned} \tag{43}$$

其中系数为:

$$\begin{aligned} c_1 &= 1 - e^{-t/\tau}, \\ c_2 &= (t + \tau) e^{-t/\tau} - \tau, \\ c_3 &= t - \tau + \tau e^{-t/\tau}, \\ c_4 &= e^{-t/\tau}, \\ c_5 &= -(t + \tau) e^{-t/\tau}, \\ c_6 &= -\tau e^{-t/\tau}. \end{aligned}$$

随后，可计算一个时间步内的通量输运:

$$\mathbf{F}_{ij} = \int_0^{\Delta t} \int \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{ij} f_{ij}(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}, \boldsymbol{\xi}) \boldsymbol{\psi} \mathrm{d}\Xi \mathrm{d}t, \tag{44}$$

其中，$\mathbf{n}^{ij}$ 为单元界面的法向量。随后，单元 i 的单元平均守恒变量可按如下方式更新:

$$\mathbf{W}_i^* = \mathbf{W}_i^n - \frac{1}{\Omega_i} \sum_{S_{ij} \in \partial\Omega_i} \mathbf{F}_{ij} S_{ij}, \tag{45}$$

其中，Ω_i 表示单元 i的体积， $\partial\Omega_i$ 表示单元 i的界面集合， S_{ij} 表示单元 i的第 j个界面的面积，$\mathbf{F}^{ij}$ 表示法向上的投影宏观通量，而 $\mathbf{W}_g = [\rho_g, \rho_g \mathbf{U}^g,\ \rho_g E_g]^T$ 表示气相的单元平均守恒流变量。

在第二部分中， $\mathcal{L}_{g2}$： $\mathbf{W}^{*} \rightarrow \mathbf{W}^{**}$ 表示喷嘴项，

$$\begin{cases} \rho_g^{**} = \rho_g^{*} + C_{\epsilon_g}^{*} \rho_g^{*} \Delta t_g, \\ \rho_g^{**} \mathbf{U}_g^{**} = \rho_g^{*} \mathbf{U}_g^{*} + C_{\epsilon_g}^{*} \rho_g^{*} \mathbf{U}_g^{*} \Delta t_g, \\ \rho_g^{**} E_g^{**} = \rho_g^{*} E_g^{*} + C_{\epsilon_g}^{*} \left(\rho_g^{*} E_g^{*} + p_g^{*} \right) \Delta t_g, \end{cases}$$

其中

$$C_{\epsilon_g}^{*} = -\frac{1}{\epsilon_g^{n+1}} \left(\frac{\epsilon_g^{n+1} - \epsilon_g^{n}}{\Delta t_s} + \mathbf{U}_g^{*} \cdot \nabla \epsilon_g^{n} \right),$$

with

$$\epsilon_g^{n} = 1 - \sum_{k=1}^{N} \epsilon_k^{n}, \quad \epsilon_g^{n+1} = 1 - \sum_{k=1}^{N} \epsilon_k^{n+1}, \quad \nabla \epsilon_g^{n} = -\sum_{k=1}^{N} \nabla \epsilon_k^{n}.$$

值得注意的是， $\nabla \epsilon_g$ 是单元内气相的单元平均体积分数梯度。以 $\partial \epsilon_g / \partial x$ 为例，其计算方式为，

$$\frac{\partial \epsilon_{g,i}}{\partial x} = \frac{\epsilon_{g,i+\frac{1}{2}} - \epsilon_{g,i-\frac{1}{2}}}{\Delta x}, \tag{46}$$

其中， $\epsilon_{g,\ i-\frac{1}{2}}$和 $\epsilon_{g,\ i+\frac{1}{2}}$分别是单元 i左右界面处气相的体积分数，可根据基于 $\epsilon_s + \epsilon_g = 1$ 在界面处重构的 ϵ_s获得。在第三部分中， $\mathcal{L}_{g3}$： $\mathbf{W}^{**} \rightarrow \mathbf{W}^{n+1}$ 用于相间相互作用，

$$\mathcal{L}_{g3}: \quad \begin{cases} \frac{\partial (\rho_g)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho_g \mathbf{U}_g)}{\partial t} = -\sum_{k=1}^{N} \frac{\epsilon_k \rho_k (\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_k)}{\epsilon_g \tau_{st}}, \\ \frac{\partial (\rho_g E_g)}{\partial t} = -\sum_{k=1}^{N} \frac{\epsilon_k \rho_k \mathbf{U}_k \cdot (\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_k)}{\epsilon_g \tau_{st}} + \sum_{k=1}^{N} \frac{3 \epsilon_k \rho_k \theta_k}{\epsilon_g \tau_{st}}, \end{cases}$$

显然，我们有 $\rho_g^{n+1} = \rho_g^{**}$。然后，第二个方程表示气相与多分散相之间的动量交换，

$$\frac{\partial \left(\rho_g \mathbf{U}_g \right)}{\partial t} = -\sum_{k=1}^{N} \frac{\epsilon_k \rho_k \left(\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_k \right)}{\epsilon_g \tau_{st}} \overset{def}{=} -\frac{1}{\epsilon_g} \beta_t \left(\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_t \right),$$

其中， β_t 和$\mathbf{U}_t$ 分别是整个固相的等效动量传递系数和速度，

$$\beta_t \overset{def}{=} \sum_{k=1}^{N} \beta_k = \sum_{k=1}^{N} \frac{\epsilon_k \rho_k}{\tau_{st,k}}, \quad \mathbf{U}_t \overset{def}{=} \sum_{k=1}^{N} \frac{\beta_k \mathbf{U}_k}{\beta_t}.$$

计算 β_t 和 $\mathbf{U}_k$ 的计算基于固相状态的 $n+1$ 变量 .

对于上述方程，$\mathbf{U}_g$ 的解析解可以得到，

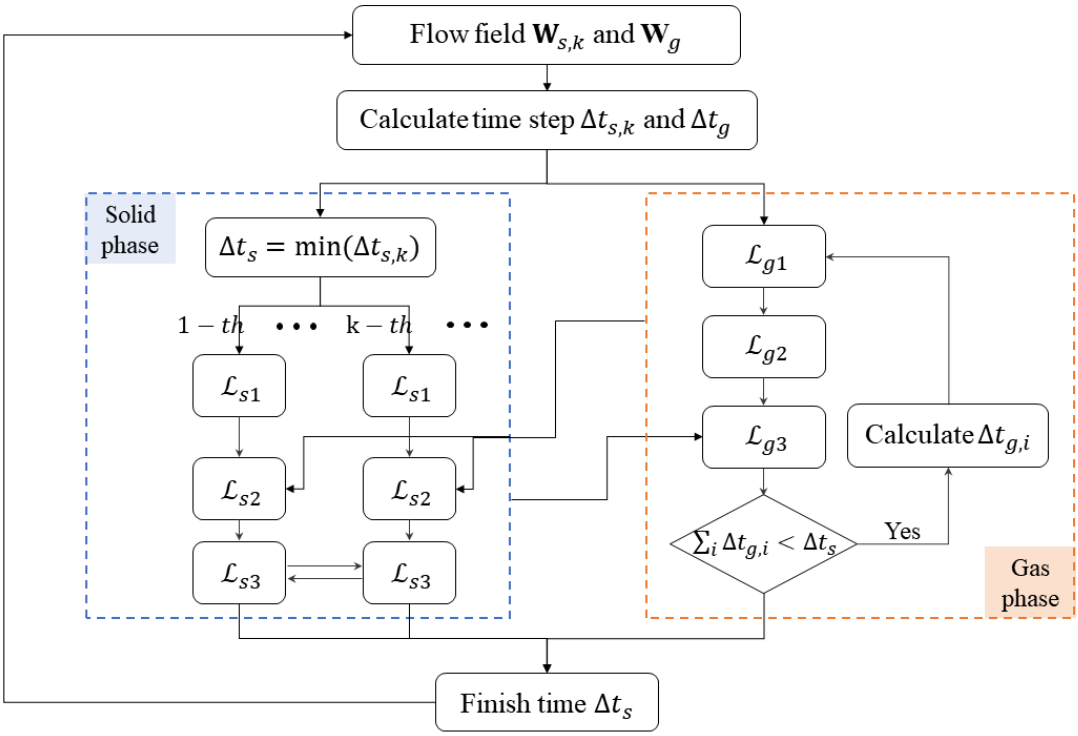
$$\mathbf{U}_g^{n+1} = \mathbf{U}_t^{n+1} + \left(\mathbf{U}_g^{**} - \mathbf{U}_t^{n+1}\right) e^{-\frac{\beta_t^{n+1}\Delta t_g}{\epsilon_g^{n+1}\rho_g^{n+1}}}.$$

最后，气相的能量可通过以下方式更新：

$$\rho_g^{n+1}E_g^{n+1} = \rho_g^{**}E_g^{**} - \left[\sum_{k=1}^{N}\frac{1}{\epsilon_g^{n+1}}\beta_k^{n+1}\mathbf{U}_k^{n+1}\cdot\left(\mathbf{U}_g^{n+1} - \mathbf{U}_k^{n+1}\right) - \sum_{k=1}^{N}\frac{3\epsilon_k^{n+1}\rho_k\theta_k^{n+1}}{\epsilon_g^{n+1}\tau_{st}}\right]\Delta t_g.$$

现在， Δt_g 中气相的演化已完成。

在演化过程中，$\Delta t_{s,k}$ 和 Δt_g 将根据 CFL条件计算；首先按一个固相时间步长 $\Delta t_s = \min(\Delta t_{s,k})$更新固相；然后根据气相时间步长 Δt_g 更新气相，直至 $\sum_i \Delta t_{g,i} = \Delta t_s$，从而完成 Δt_s 中的气固两相流演化。图 1 给出了用于多分散气固流的 GKS-UGKWP流程图。



Fig图 1：多分散气固两相流 GKS-UGKWP方法的流程图 .

4. 数值实验

4.1. 循环流化床

4.1.1. 案例描述

第一种情况是具有两种分散固相的循环流化床（CFB） [24, 39]。实验数据将用于验证GKS-UGKWP方法。与之前的研究 [39], 一样，本文采用带有 $D \times H = 0.4m \times 3m$ 的二维计算域。整个计算域采用均匀矩形网格，网格数量为 66×500，相应的单元尺寸为 $\Delta_x \approx \Delta_y = 6 \times 10^{-3} m$。根据实验测量 [24], ，固体颗粒的总储量为 $2.85kg$，各分散相的质量分数、直径和材料密度列于表1中。本案例中，最大固相体积分数取为$\epsilon_{t,max} = 0.55$ 。初始时，固相均匀分布于整个计算域内，根据表1所示的质量，初始固相体积分数分别为 $\epsilon_1 = 0.0498$ 和 $\epsilon_2 = 0.0140$，并假设提升管厚度为 $T = 1.5cm$，这与 [39]中采用的数值相同。在模拟中，固体颗粒可以从顶部边界自由离开计算域。为简化模拟，左、右边界均为固定壁面，因此逸出的固体颗粒将从底部边界补充回计算域，而不是像 [39]中那样打开右侧边界。速度为 $U_g = 2.25m/s$ 的气体通过底部边界流入计算域，使固体颗粒流化。对于左、右壁面边界，固相和气相分别采用混合边界条件 [14]和无滑移壁面边界条件。对于该情况，广泛使用的由Gibilaro提出的阻力关联式用于两种分散相 [8, 23], ，其可写为

$$\beta_k = \left(\frac{17.3}{Re_{s,k}} + 0.336 \right) \frac{\rho_g |\mathbf{U}_g - \mathbf{u}_k|}{d_k} \epsilon_k \epsilon_g^{-1.8}, \tag{47}$$

其中，$Re_{s,k} = \epsilon_g \rho_g d_k |\mathbf{U}_g - \mathbf{u}_k| / \mu_g$ 是第 Re 个分散固相的 k。值得注意的是，对于每个分散相，$\tau_{st,k}$ 可通过关系式 $\beta_k = \epsilon_k \rho_k / \tau_{st,k}$ 得到。

表1：CFB算例中固体颗粒的性质 [24]。

	总质量（kg）	质量分数	直径（μm）	材料密度（kg/m^3）
小颗粒	2.223	78.0%	225	2480
大颗粒	0.627	22.0%	416	2480

4.1.2. 结果

在此情况下，模拟时间为 $10.0s$，并使用从 $6.0s$ 到 $10.0s$ 的结果进行平均。从物理角度来看，为研究提升管中不同垂直位置处的流动特性，在实验中分别于 $h = 0.32m, 0.40m, 0.80m, 1.20m$ 设置了四个测量点。数值上，对上述四个高度处的固相总体积体积分数 ϵ_t 和固相的总体垂直速度U_s 进行平均，并在图2中与实验测量进行比较。需要注意的是，整个固相的总体垂直速度 U_s 通过

按固相体积分数加权的各个速度，$U_s = \sum_k \epsilon_k U_{s,k} / \sum_k \epsilon_k$。图2显示，数值预测结果与实验测量基本一致。在 $h = 1.20m$, $\epsilon_t \simeq 2\%$处，GKS-UGKWP预测值略低于实验值 $\simeq 6\%$，这可能是由于边界处理造成的：从顶部边界逸出的粒子通过底部边界得到补充，而不是通过侧壁补充。图3展示了 ϵ_t 不同时刻的固体颗粒快照。总体而言，固体颗粒倾向于在提升管底部和靠近壁面处聚集，导致这些区域的浓度相对较高。此外，瞬时结果清晰地显示了瞬时共存且动态相互作用的稀相/密相流动区域。混合EE/EL方法很难平滑地捕捉空间演化的固相体积分数。在单分散循环流化床案例的研究中也发现了上述特征。

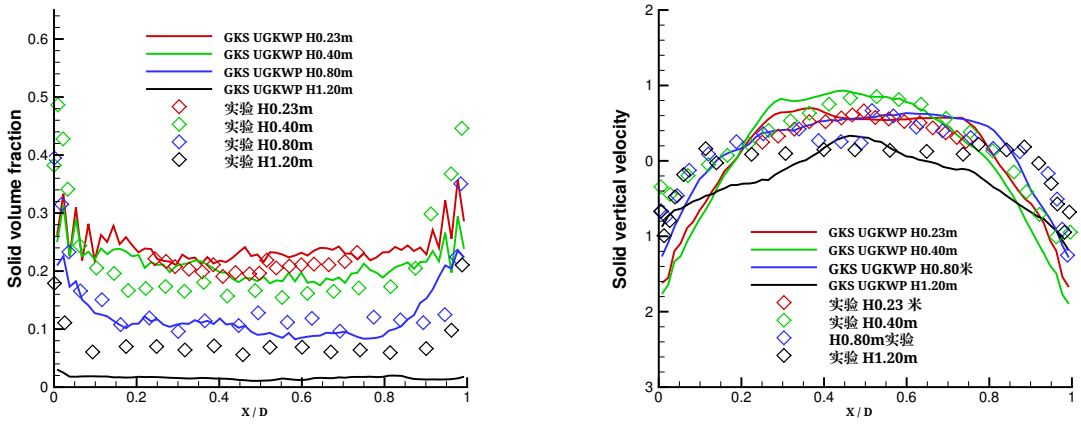
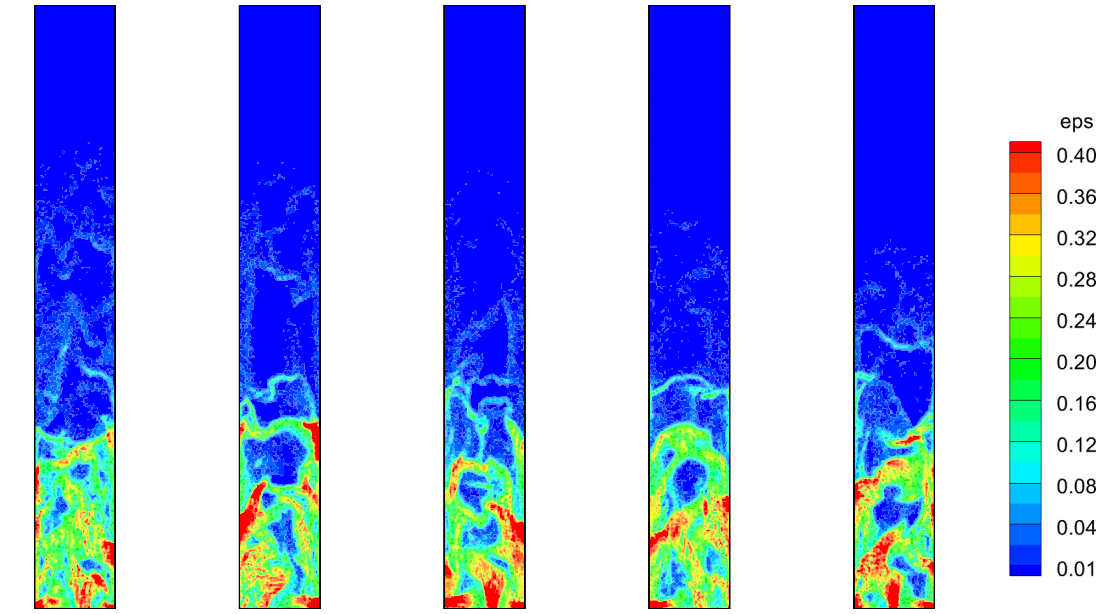


图 2：采用 GKS-UGKWP 方法得到的不同提升管高度处时间平均总固相体积分数 ϵ_t 和固相总体垂直速度 U_s 的分布，并与实验测量结果进行比较。

每种分散固体相的 Kn_k 由$_k = \frac{\tau_k}{\Delta t_s}$ 定义，其中τ_k 为第 k种分散相的局部碰撞时间，如图4所示。图4还展示了按 Kn_k分布的波动分量（ ϵ_k^{wave}的等值线）以及粒子分量（按垂直速度着色的采样粒子集合） P_k。请注意，波动分量 ϵ_k^{wave}与固体颗粒分量 P_k 之和等于图4所示的 ϵ_k 。图4还给出了各固相的垂直速度$U_{s,k}$ 。两个颗粒相的 ϵ 和 U_s 空间分布各不相同，这表明采用多分散方法的必要性。对于两种固相，由于颗粒在提升管底部附近和壁面附近区域聚集并发生碰撞，这些区域的 Kn 通常较小。两种分散固体颗粒相根据各自的 Kn，在 UGKWP 中调整其波动分量和粒子分量的权重。GKS-UGKWP 用于多分散流的一个明显优势是，每种分散相都可以采用最高效的方式，将其分解为波动和粒子。



(a) $t = 6.0s$ (b) $t = 7.0s$ (c) $t = 8.0s$ (d) $t = 9.0s$ (e) $t = 10.0s$

图3：时间为 $t = 6.0s$ 时的总固相体积分数瞬时快照 ϵ_t， $7.0s$， $8.0s$， $9.0s$， $10.0s$。

4.2. 湍流流化床

4.2.1. 案例描述

致密湍流流化床（TFB）应用于石油炼制行业，并已通过实验和数值方法进行研究 [16, 7]。本问题涉及两种粒子：FCC催化剂（细颗粒）和小米（粗颗粒），其详细属性见表2。表2显示，两种粒子的密度非常接近，而粒径则相差很大。这种流动条件给仅含单一固相的气固系统数值方法带来了挑战，而 GKS-UGKWP 中对多个固相进行跟踪似乎适用于这一问题。本文研究初始床层高度为 $H_0 = 1.155m$ 、气体速度为 $U_g = 0.53m/s$ 的工况。计算域为 $D \times H = 0.5m \times 4m$，由均匀矩形网格 40×300覆盖。本研究将最大固相体积分数设为$\epsilon_{s,max} = 0.65$。模拟开始时，所有固体颗粒均匀分布于整个提升管内，小颗粒相和大颗粒相的初始体积分数分别为 $\epsilon_1 = 0.118$ 和 $\epsilon_2 = 0.070$。从顶部边界逸出的固体颗粒将经底部边界循环回计算域。对于气相，顶部边界采用标准大气条件，气体以速度 U_g 从底部边界吹入提升管，且顶部边界与底部边界之间的压差为$\Delta p = \epsilon_{s,max}(\rho_s^* - \rho_g) GH_0$，其中 $\rho_s^* = 1463.3kg/m^3$ 为按初始体积分数加权的固体颗粒密度。与上述循环流化床工况相同，颗粒相和气相在侧壁分别采用混合边界条件和无滑移壁面边界条件。

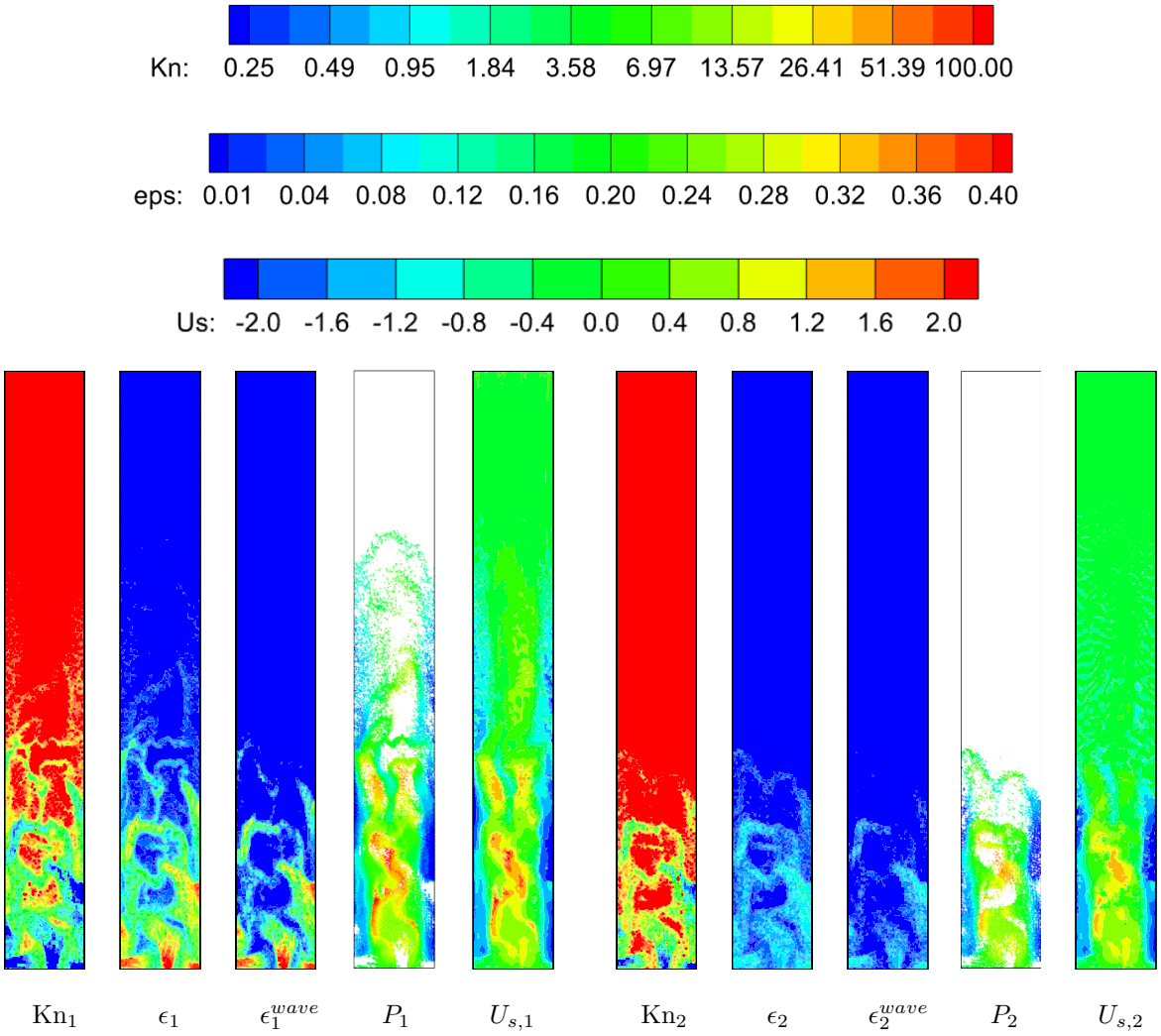


图4：UGKWP中克努森数、固相体积分数 ϵ、UGKWP中由波分量产生的固相体积分数 ϵ^{wave}、UGKWP中的采样粒子集 P以及固相垂直速度 U_s 在$t = 8.0s$时的瞬时快照。下标为1的图是第一固相（小颗粒）的结果，下标为2的图是第二固相（大颗粒）的结果。克努森数$_k$ 根据Kn图例着色。固相体积分数 ϵ_k 及其对应的波分量 ϵ_k^{wave}根据eps图例着色。粒子集 P_k 中的离散颗粒和固相垂直速度$U_{s,k}$ 根据Us图例着色，其中 $k = 1,2$。Kn图例采用指数分布。注意， ϵ_1 与 ϵ_2 之和恰好等于图3中 $t = 8.0s$ 所示的 ϵ_t 。

表2：TFB 中细颗粒和粗颗粒的性质 [7]。

固相	质量分数	直径（μm）	材料密度 (kg/m^3)	Geldart分组
FCC催化剂	64.2%	60	1500	Geldart A
小米	35.8%	930	1402	Geldart D

在GKS-UGKWP中，各固相均可为多分散系统选择最准确、最合适的阻力模型。如表2所示，细颗粒和粗颗粒分别属于Geldart A组和D组，并采用不同的阻力模型来评估FCC催化剂和小米颗粒相中的气固相互作用。研究并比较了不同的阻力模型及其修正版本 [7]。具体而言，对于粗颗粒，采用Gidaspow模型 [9],

$$\beta_k = \begin{cases} 150\dfrac{\epsilon_k\left(1-\epsilon_g\right)\mu_g}{\epsilon_g d_k^2} + 1.75\dfrac{\epsilon_k\rho_g|\mathbf{U}_g-\mathbf{u}_k|}{d_k}, & \epsilon_g \le 0.8, \\ \dfrac{3}{4}C_d\left(Re_{s,k}\right)\dfrac{\epsilon_k\epsilon_g\rho_g}{d_k}|\mathbf{U}_g-\mathbf{u}_k|\epsilon_g^{-2.65}, & \epsilon_g > 0.8, \end{cases} \tag{48}$$

而对于细小的FCC催化剂颗粒，则采用四区域阻力模型,

$$\beta_k = \begin{cases} 150\dfrac{\epsilon_k\left(1-\epsilon_g\right)\mu_g}{\epsilon_g\left(d_k^*\right)^2} + 1.75\dfrac{\epsilon_k\rho_g|\mathbf{U}_g-\mathbf{u}_k|}{d_k^*}, & 0 \le \epsilon_g \le 0.8, \\ \dfrac{5}{72}C_d\left(Re_{s,k}^*\right)\dfrac{\epsilon_k\epsilon_g\rho_g}{d_k^*\left(1-\epsilon_g\right)^{0.293}}|\mathbf{U}_g-\mathbf{u}_k|, & 0.8 < \epsilon_g \le 0.933, \\ \dfrac{3}{4}C_d\left(Re_{s,k}\right)\dfrac{\epsilon_k\epsilon_g\rho_g}{d_k}|\mathbf{U}_g-\mathbf{u}_k|\epsilon_g^{-2.65}, & 0.933 < \epsilon_g \le 0.990, \\ \dfrac{3}{4}C_d\left(Re_{s,k}\right)\dfrac{\epsilon_k\rho_g}{d_k}|\mathbf{U}_g-\mathbf{u}_k|, & 0.990 < \epsilon_g \le 1.0, \end{cases} \tag{49}$$

其中， d_k 是固体颗粒的直径，方程（49）中的 d_k^* 是FCC催化剂颗粒 [7, 16]的有效直径。考虑到颗粒团簇的影响，为了更好地符合实验测量结果 [7], ， d_k 取为 $300\mu m$ ，本文也采用了这一取值。此外，方程（48）和方程（49）中的 C_d 和$Re_{s,\ k}$ 定义如下:

$$C_d\left(Re_k\right) = \begin{cases} \dfrac{24}{Re_k}\left(1+0.15Re_k^{0.687}\right), & Re_k \le 1000, \\ 0.44, & Re_k > 1000, \end{cases}$$

and

$$Re_{s,k} = \frac{\epsilon_g\rho_g d_k|\mathbf{U}_g-\mathbf{u}_k|}{\mu_g}, \quad Re_{s,k}^* = \frac{\epsilon_g\rho_g d_k^*|\mathbf{U}_g-\mathbf{u}_k|}{\mu_g}.$$

4.2.2. 结果

从 $10.0s$ 到 $15.0s$ 的时间平均结果如图5所示。提升管内固相在底部区域的浓度较高，而在顶部区域的密度较低，过渡区域很小，约为 $1.7m \sim 2.0m$。总体而言，预测的固相表观密度与实验测量结果吻合良好。此外，图5还展示了两种固相的 ϵ 分布，并表明其沿提升管高度呈现相似的变化趋势。

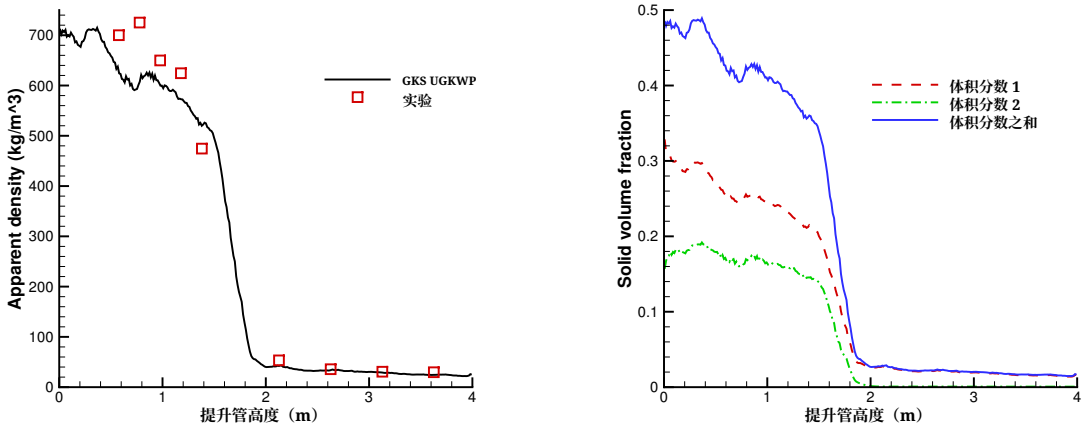
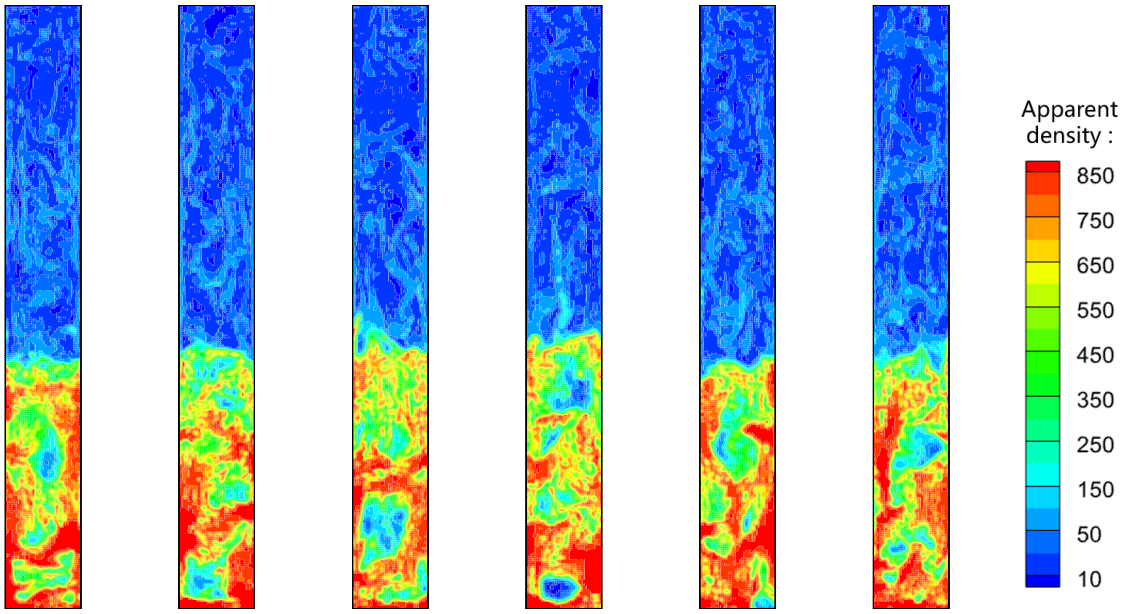


图5：左：通过GKS-UGKWP方法得到的沿提升管高度$\sum_k \epsilon_k \rho_k$ 处整个固相的时间平均表观密度分布，并与实验测量结果进行比较。右：各分散相 ϵ_k，$k = 1$，2，的时间平均固相体积分数分布及其总和 ϵ_t。

图6给出了 $10.0s \sim 15.0s$的固相密度瞬时快照 $\sum_k \epsilon_k \rho_k$，展现了TFB的典型特征。底部密相区/中部过渡区/上部稀相区共存的形态得到了很好的捕捉。上部稀相区中的所有固体颗粒均为FCC催化剂（Geldart A型）。图6展示了颗粒团聚现象，这给这些区域的阻力建模带来了困难。在底部密相区域，内部含有不同固体颗粒的气泡呈现出复杂形态，并与致密固相相互缠绕。

由于两个固相（$60\mu m$ 和 $930\ \mu m$）的直径相差15倍，因此展示它们各自的分布很有意义。图7显示了在 $t = 11.0s$处各相的表观密度 $\epsilon_k \rho_k$, $k = 1$，2。总和 $\sum_k \epsilon_k \rho_k$ 恰好是图6(b)中 $11.0s$ 处的表观密度。一个显著特征是，在上部稀相区域，仅存在较小的颗粒（FCC催化剂），而不存在小米颗粒，这与图5中 ϵ 的时间平均剖面一致。此外，在 $h \approx 1.7m$处的两个固相中，都存在一个分隔区：上方克努森数较大，下方克努森数较小。与FFC催化剂相相比，小米相在底部密相区域表现出强烈的非平衡状态，克努森数较大。根据局部克努森数确定的波和颗粒分解结果，通过图7中的等值线表观密度 $\epsilon_k \rho_k$ 和散布的粒子集 P_k展示。对于FCC催化剂相，拉格朗日粒子完全决定了其演化



(a) $t = 10.0s$ (b) $t = 11.0s$ (c) $t = 12.0s$ (d) $t = 13.0s$ (e) $t = 14.0s$ (f) $t = 15.0s$

图 6：在 $t = 10.0 \sim 15.0s$ 时，整个固相 $\sum_k \epsilon_k \rho_k$ 的表观密度瞬时快照。

在上部稀相区域，而在底部区域，波分量占主导，其中存在大量真实粒子及其碰撞。对于小米大颗粒相，即使在底部密相区域，也会采样并追踪大量粒子在其演化过程中的变化。

需要强调气固系统中的稀相/密相和平衡/非平衡概念。稀相流或密相流通常由固相体积分数决定，而平衡或非平衡则由固体颗粒相的克努森数决定。稀相流区域和密相流区域都可能对应非平衡或平衡状态，尤其是在颗粒直径或材料密度差异较大的密相颗粒流中。在 UGKWP 中，克努森数用于根据局部非平衡程度确定波与颗粒的分解。图 8 展示了不同时间各分散相的克努森数快照。对于两种分散相，在 $h < 1.7m$ 处的底部密相区域中，非平衡/平衡状态在空间上并非固定，而是会动态地相互转化。所提出的适用于多分散流的 GKS-UGKWP 方法能够对各固相进行处理，并实现波与颗粒的最优分解。

4.3. 激波与致密颗粒幕的相互作用

4.3.1. 案例描述

激波与固体颗粒床的相互作用是一个极具挑战性的问题，数值方法必须能够捕捉超音速下的激波传播，并计算气固相间相互作用以及中等/致密工况下的粒子间碰撞 [17, 35]。本文研究平面激波与颗粒帘的相互作用，

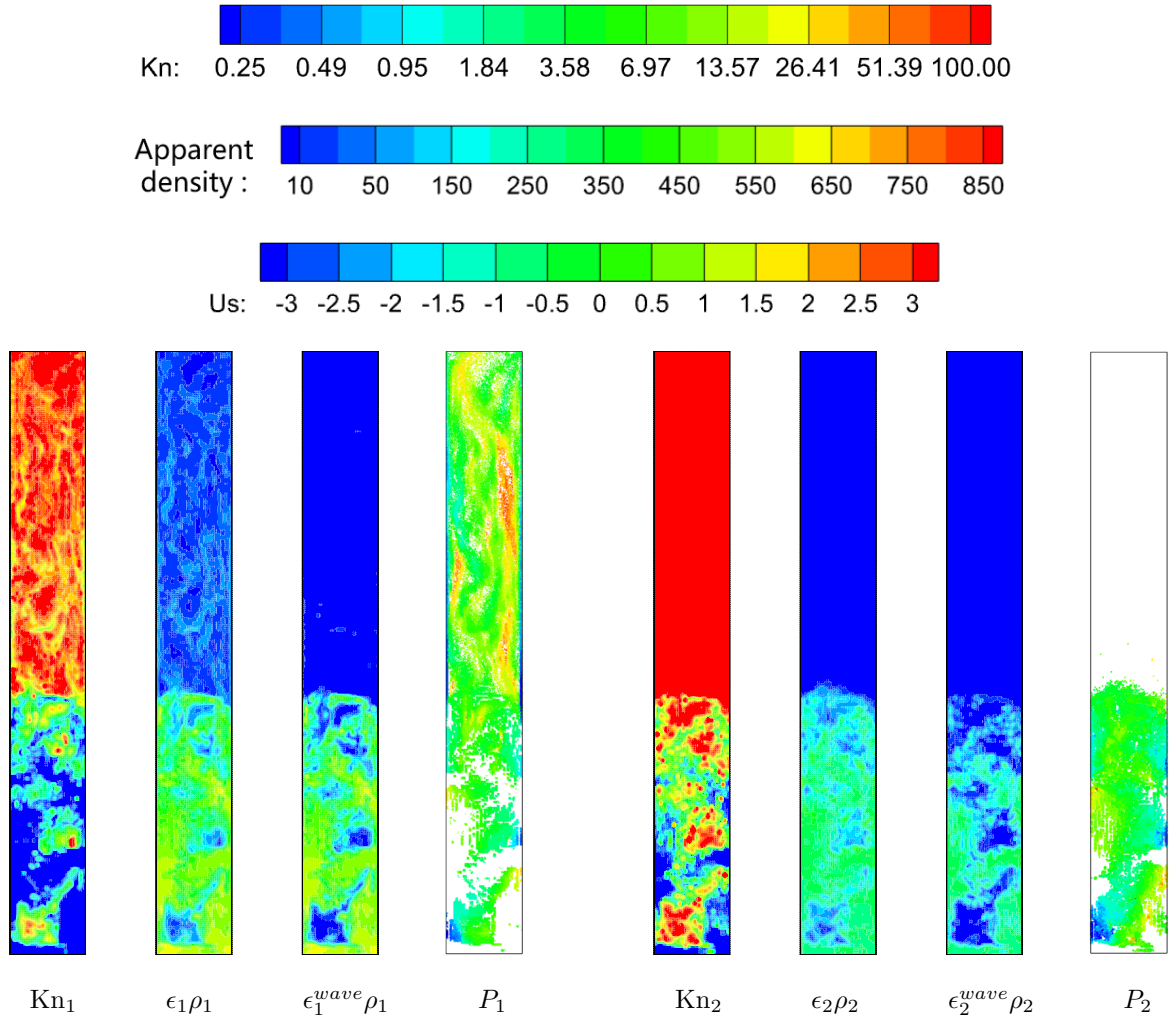


图7：克努森数$_k$、固相表观密度 $\epsilon_k\rho_k$、UGKWP中的波分量对应的固相表观密度 $\epsilon_k^{wave}\rho_k$以及UGKWP中的采样粒子集 P_k 在 $t = 11.0s$时的瞬时快照。下标1和2分别表示第1种（FCC催化剂颗粒）固相和第2种（小米颗粒）固相。克努森数$_k$ 按克努森数图例着色，固相表观密度 $\epsilon_k\rho_k$ 和波分量 $\epsilon_k^{wave}\rho_k$ 按表观密度图例着色，粒子集 P_k 中的离散颗粒则按Us图例（固相颗粒的垂直速度）着色，其中 $k = 1,2$。克努森数图例采用指数分布。

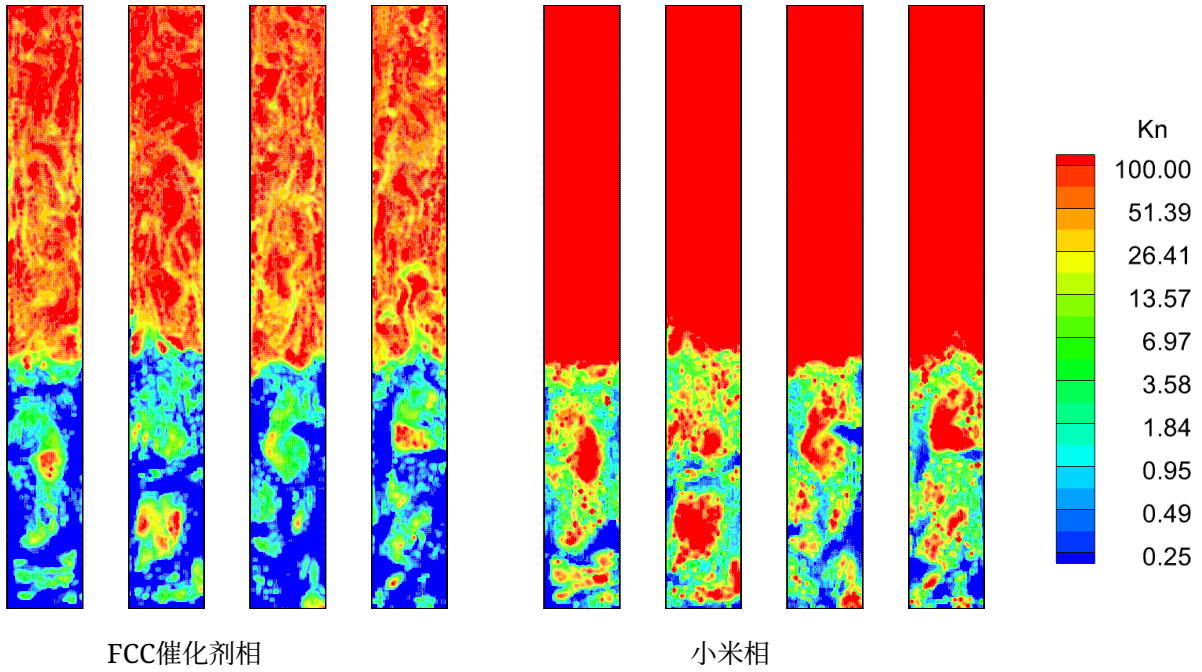


图 8：不同时刻 PCC 催化剂颗粒和小米颗粒相的克努森数瞬时快照：从左到右依次为 $t = 10s$、$12s$、$14s$、$15s$. 克努森数的图例采用指数分布。

采用GKS-UGKWP方法在二维空间中进行研究，并将模拟结果与实验测量结果 [17]进行比较。如图9(a)所示，气体管中的平面激波以Ma $= 1.66$ 从左向右（x 方向）运动，并与一个初始静止、宽度为 $L = 2mm$的颗粒帘相遇。从激波冲击固体颗粒床层开始，将产生一个向左运动的反射激波和一个向右运动的透射激波。同时，在高速气流的驱动下，固体颗粒将跟随透射激波前沿向右运动。计算域 $X \times Y$为 $[-0.375m, 0.125m] \times [-0.04m, 0.04m]$, 并由包含 1000×160 个单元的均匀矩形网格覆盖。实验中，固体颗粒的直径分布为 $106\mu m \sim 125\mu m$。而在计算中，模拟基于两个分散相，其固体颗粒直径分别为 $d_1 = 110\mu m$和 $d_2 = 120\mu m$。所有固体颗粒的材料密度为 $\rho_s = 2520kg/m^3$。初始时，固体颗粒均匀分布，具有 $\epsilon_1 = 0.105$和 $\epsilon_2 = 0.105$。计算域内气相的初始状态与实验相同：$p_{g,\ 1} = 8.27 \times 10^4 Pa$,$U_{g,\ 1} = 0m/s$ 和$T_{g,\ 1} = 296.40K$，气体常数为 $R = 287.05J/$（$kg \cdot K$），比热比为 $\gamma = 1.4$。在左边界处，Ma $= 1.66$ 下的激波前条件为$p_{g,\ 2} = 2.52 \times 10^5 Pa$, $U_{g,\ 2} = 304.16m/s$ 和$T_{g,\ 2} = 423.79K$。右边界采用自由边界条件。此外，对于顶部和底部边界，气体和固体颗粒相分别采用无滑移和滑移边界条件。为监测气流的压力，在初始颗粒帘左侧前缘的上游 $68.6mm$ 和下游$64.2mm$ 分别设置了两个测压位置。在这种情况下，内部

气相的自由度通过 $K\left(\tilde{t}\right)=K_0+1.0\times\left(\tilde{t}/\tilde{t}_{end}\right)^3$ 建模，以模拟气流与分散固体颗粒相互作用导致的湍流强度增加。$\tilde{t}=\frac{t}{L/u_s}$ 是以颗粒帘的初始宽度 L 和激波速度 $u_s=572.00m/s$ 归一化的时间，$\tilde{t}_{end}$ 是归一化模拟时间，本例中取值为 350。0】【。

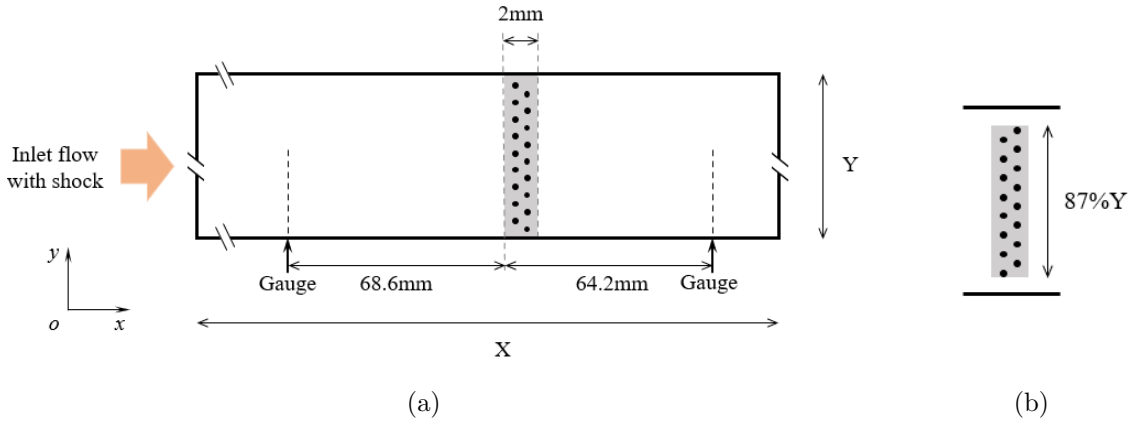


图 9：激波与致密颗粒幕相互作用示意图：(a)不含近壁间隙的整个计算域；(b) 含近壁间隙的局部颗粒分布（展向 87% 的颗粒帘）。

第 k个分散相中固体颗粒所受的阻力可写成一般形式，

$$\mathbf{D}=3\pi\mu_g d_k\left(\mathbf{U}_g-\mathbf{u}\right)\frac{Re_k}{24}C_D^*,$$

其中 Re_k 为颗粒雷诺数，C_D^* 为颗粒阻力系数。根据式（2）中 $\mathbf{D}$ 的定义，可得 $\tau_{st,k}$ ，

$$\tau_{st,k}=\frac{4}{3}\frac{\rho_k d_k^2}{\mu_g C_D^* Re_k}. \tag{50}$$

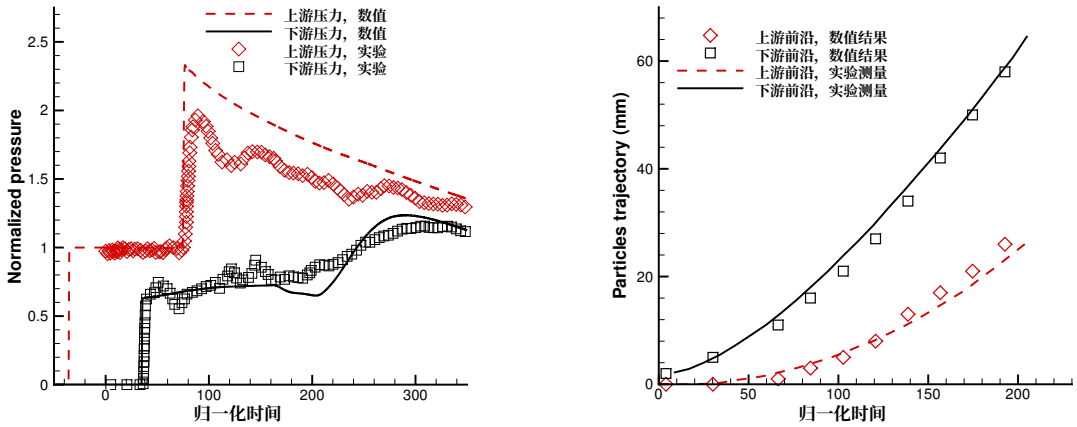
本文中，颗粒阻力系数 C_D^* 通过 $C_D^*=c_1\left(\epsilon_k\right)c_2C_{D,\ tad}$计算，其中$C_{D,\ std}$ 是 Clift 提出的标准阻力关联式 [3],

$$C_{D,std}=\frac{24}{Re_k}\left(1.0+0.15Re_k^{0.687}\right)+0.42\left(1.0+\frac{42500}{Re_k^{1.16}}\right),$$

$c_1(\epsilon_k)=\frac{1+2\epsilon_k}{(1-\epsilon_k)^2}$ 是 Sangani 等人提出的、用于描述有限粒子体积分数影响的相关因子。 [25], 而 c_2 是相关因子，其取值为 4。0，以便更好地符合实验测量结果；它可解释为其他力（如附加质量力、黏性非定常力等）的综合作用。

4.3.2. 结果

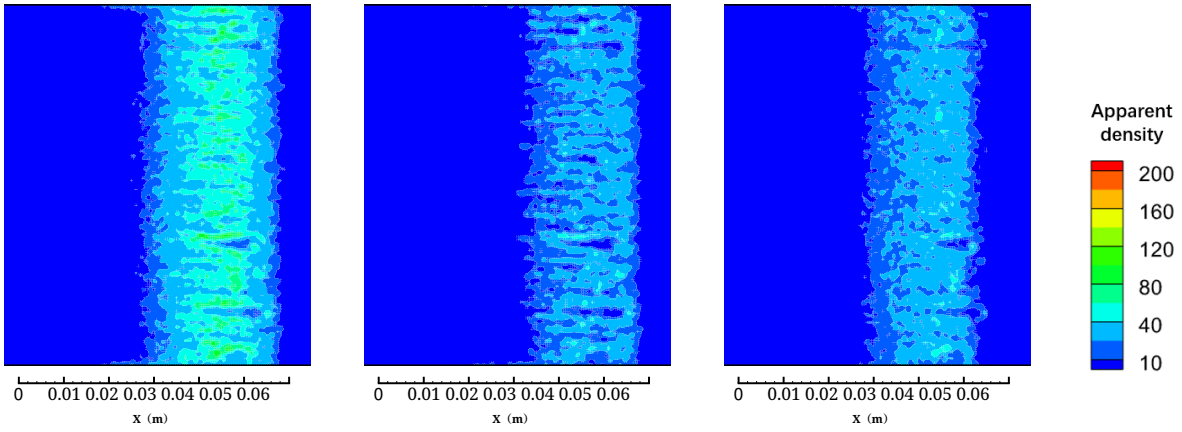
测压位置处随时间变化的压力如图10(a)所示，并与实验测量结果进行了比较。请注意，上游和下游测压位置处的压力均沿 y 方向取平均值。与 [17], 中的做法相同，压力 $p_g\left(\tilde{t}\right)$ 通过 $^{p_g}(\tilde{t})$ $-p_{g\,1}$,,,进行归一化。总体而言，反射激波和透射激波均能得到较好的捕捉。此外，固体颗粒云的上游前沿和下游前沿轨迹如图10(b)所示，与实验数据吻合良好。˜ $t = 193.0$ 处固体颗粒分布的瞬时快照见图11。固体颗粒在所在区域内分布不均匀：中心区域（约在 $x = 0.045m$处）的浓度高于上游和下游前沿附近区域。此外，还可观察到轻微的颗粒团聚现象。进一步比较第一和第二分散相可知，粒径较小的第一固相 $d_1 = 110\mu m$ 移动速度更快（约为 $3mm$），比具有$d_2 = 120\mu m$ 的第二相在上游和下游前沿处均快。



(a) (b)

图 10：数值结果（标记为“数值结果”）和实验测量（标记为“实验测量”）：(a) 上游和下游测压点处随时间变化的气体压力；(b) 颗粒云前沿的轨迹。

在实验中，固体颗粒帘由颗粒从储料器自由落入测试段 [17]而形成。正如实验中所指出的，颗粒帘在横向方向上占据约87%的范围（图9中的y 方向）。因此，颗粒帘与壁面之间存在间隙，这一点在此处也进行了研究。根据管内颗粒帘占据87%的实验结果，将考虑靠近壁面的13%间隙。采用新的装置后，新计算得到的压力和粒子轨迹如图12所示。有趣的是，在˜下游测压位置处，时间为 $t = 50 \sim 80$ 时的压力变化在透射激波通过后先出现下降，随后气体压力上升，并且与.....有更好的一致性



(a) 所有固体颗粒　　(b) 含有 d_1的固体颗粒　　(c) 带有 d_2 的固体颗粒

˜图11：归一化时间 $t = 193.0$ 时颗粒相表观密度的瞬时快照：(a)整个固体颗粒相，(b)具有 $d_1 = 110\mu m$ 的第1颗粒相，以及(c) 具有 $d_2 = 120\mu m$ 的第2颗粒相。注意，此处仅显示 $[0m, 0.06m] \times [-0.04m, 0.04m]$ 的区域。

实验数据比之前粒子幕占比为100%的计算结果更接近，后者在图12中以蓝色圆圈标记。

5. 结论

本文针对多分散气固系统，开发了一种多尺度GKS-UGKWP方法。特别地，构建了适用于耦合分散固体颗粒相与气相系统的依赖网格分辨率的动力学模型，并将其用于相应多尺度方法的设计。为了捕捉颗粒相演化中的平衡态和非平衡态，UGKWP根据每个固体颗粒相各自的局部克努森数，将颗粒分布分解为波与离散颗粒组分。对于具有不同物理性质（如颗粒尺寸、浓度和材料）的各个固体颗粒相，UGKWP通过确定性波和统计颗粒的组合，在充分考虑物理精度和数值效率的基础上，将自动选择描述固体颗粒动力学的最优方式。UGKWP的一个显著特征是，波粒分解能够在相应的颗粒连续介质和非平衡状态下，自动恢复气固系统的欧拉-欧拉方法和欧拉-拉格朗日方法。在流化床中模拟了两种稠密多分散流。具体而言，在FCC催化剂反应器中，大尺寸小米颗粒与小尺寸FCC催化剂颗粒的颗粒尺寸相差15倍。数值实验表明，提升管的顶部区域仅出现细小的FCC催化剂颗粒，而小米颗粒仅存在于底部密相区域。此外，对于FCC催化剂相，离散颗粒描述在顶部稀相区域中发挥着关键作用，

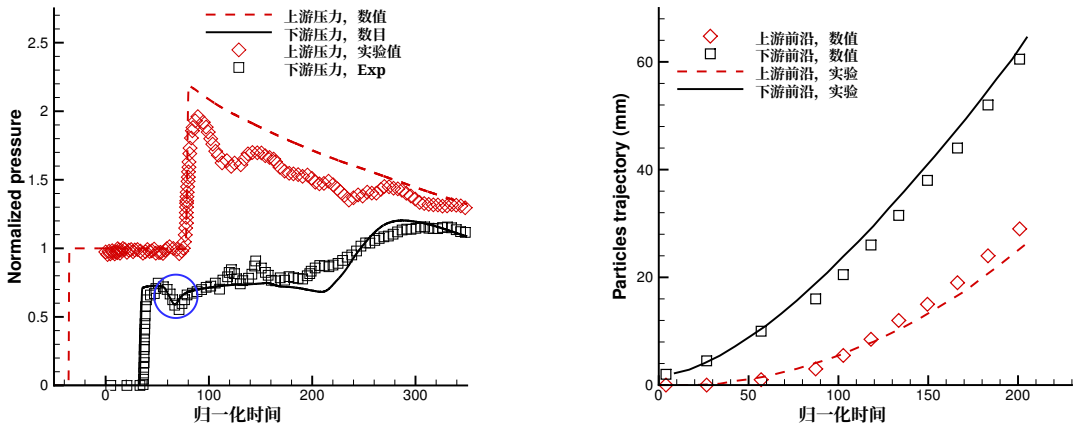


图12：如图9(b)所示，颗粒占据率为87%时的数值结果（以“Num”表示）和实验测量（以“Exp”表示）：(a) 上游和下游测压点处随时间变化的气体压力；(b) 颗粒云前沿的轨迹。

即使存在大量真实粒子，波描述在底部致密区的贡献仍然更大。对于大颗粒相，小米粒子仅存在于底部密相区域，需要采用离散颗粒描述来捕捉局部非平衡态。上述观察表明，波粒分解在描述分散固相方面具有灵活性，并且能够自适应地动态跟踪平衡与非平衡流动演化。同时，当前方法还研究了 $Ma = 1.66$ 激波冲击含有多分散固体颗粒相的致密颗粒幕这一过程。将数值解（例如测压点处气流的压力以及固体颗粒云前沿的轨迹）与实验测量进行了比较。总体而言，与现有的单尺度方法相比，GKS-UGKWP在模拟气固多相流方面表现良好。

致谢

本研究获得国家重点研发计划（项目编号：2022YFA1004500）、国家自然科学基金（12172316）和香港研究资助局（16208021、16301222）的资助。

参考文献

[1] Fernando Cello、Alberto Di Renzo 和 Francesco Paolo Di Maio。多分散悬浮液中阻力及流体-颗粒相互作用的半经验模型。《化学工程科学》，65(10):3128–3139，2010年。[2] Xizhong Chen、王俊武和李静海。含多分散颗粒的循环流化床提升管中非均匀气固流的粗网格模拟。《化学工程杂志》，234:173–183，2013年。

[3] R·克利夫特。湍流气流中粒子的运动。Proc. Chemeca，1:14，1970。[4] Jingxi Dou、Limin Wang、葛蔚和Jie Ouyang。介观结构对气固流中固相应力的影响。《化学工程杂志》，455:140825，2023年。[5] Rong Fan 和 Rodney O Fox。多分散流化床中的偏析：多流体模型的验证。《化学工程科学》，63(1):272–285，2008年。[6] Yuqing Q Feng、BH Xu、SJ Zhang、AB Yu 和 P Zulli。颗粒混合物气体流化的离散颗粒模拟。AIChE Journal，50(8):1713–1728，2004年。[7] Jinsen Gao、Xingying Lan、Yiping Fan、Jian Chang、Gang Wang、Chunxi Lu 和 Chunming Xu。不同尺寸二元颗粒气固流化床的流体动力学。《化学工程科学》，64(20):4302–4316，2009年。[8] LG Gibilaro、R Di Felice、SP Waldram 和 Pier Ugo Foscolo。流体-颗粒相互作用的广义摩擦因子和阻力系数关联式。《化学工程科学》，40(10):1817–1823，1985年。[9] Dimitri Gidaspow。多相流与流态化：连续介质和动理学理论描述。Academic Press，1994年。[10] Yongxiang He、Haibo Zhao、Haoming Wang 和 Chuguang Zheng。气固流中粒子碰撞的差分加权直接模拟蒙特卡罗方法。《颗粒学》，21:135–145，2015年。[11] Ryan W Houim 和 Elaine S Oran。可压缩颗粒-气体流的多相模型：公式构建与初步测试。Journal of Fluid Mechanics，789:166，2016年。[12] 陆慧琳和Dimitri Gidaspow。提升管中二元流化的流体动力学：采用两种颗粒温度的CFD模拟。《化学工程科学》，58(16):3777–3792，2003年。[13] Mamoru Ishii 和 Takashi Hibiki。两相流热流体动力学。Springer Science & Business Media，2006年。[14] Paul C Johnson 和 Roy Jackson。颗粒材料的摩擦-碰撞本构关系及其在平面剪切中的应用。Journal of Fluid Mechanics，176:67–93，1987年。[15] 李静海和Mooson Kwauk。颗粒-流体两相流：能量最小化多尺度方法。冶金工业出版社，1994年。[16] Peng Li、Xingying Lan、Chunming Xu、Gang Wang、Chunxi Lu 和 Jinsen Gao。模拟FCC颗粒湍流流化气固流的阻力模型。《颗粒学》，7(4):269–277，2009年。[17] Y Ling、JL Wagner、SJ Beresh、SP Kearney 和 S Balachandar。平面激波与致密颗粒幕的相互作用：建模与实验。《流体物理学》，24(11):113301，2012年。[18] Chang Liu、Zhao Wang 和徐昆。连续流与稀薄流统一气体动理学格式VI：稀薄分散气体-粒子多相系统。《计算物理学杂志》，386:264–295，2019年。[19] Chang Liu 和徐昆。连续流与稀薄流统一气体动理学格式V：多尺度、多组分等离子体输运。《计算物理通讯》，22(5):1175–1223，2017年。[20] Chang Liu、Yajun Zhu 和徐昆。统一气体动理学波粒子方法I：连续流与稀薄气体流。《计算物理学杂志》，401:108977，2020年。[21] Daniele L Marchisio 和 Rodney O Fox。多分散颗粒及多相系统的计算模型。剑桥大学出版社，2013年。[22] Vidar Mathiesen、Tron Solberg、Hamid Arastoopour 和 Bjørn H Hjertager。循环流化床提升管中多相气体/粒子流的实验与计算研究。AIChE Journal，45(12):2503–2518，1999年。[23] Tim Mckeen 和 Todd Pugsley。FCC催化剂自由鼓泡床的模拟与实验验证。《粉体技术》，129(1-3):139–152，2003年。[24] Timo Johannes Niemi。气体-粒子流CFD模拟中的粒径分布。硕士论文，2012年。[25] M Parmar、A Haselbacher 和 S Balachandar。亚临界可压缩流中圆柱体和球体所受非定常无黏力。《英国皇家学会哲学汇刊A辑：数学、物理与工程科学》，366(1873):2161–2175，2008年。

[26] A Passalacqua、RO Fox、R Garg 和 S Subramaniam。用于稀相至中等稀相流体–颗粒流的全耦合基于求积的矩方法。《化学工程科学》，65(7):2267–2283，2010年。[27] 秦志远、周权和王俊武。用于循环流化床提升管中多分散气固流粗网格模拟的EMMS曳力模型。《化学工程科学》，207:358–378，2019年。[28] 张庆红、王淑艳、陆慧琳、刘国栋、王帅和赵光博。应用于气固鼓泡流化床的欧拉流体相–欧拉固体相–拉格朗日离散颗粒耦合混合模型。《粉体技术》，315:385–397，2017年。[29] LW Rong、KJ Dong 和 AB Yu。球形颗粒填充床中流体流动的格子玻尔兹曼模拟：粒径分布的影响。《化学工程科学》，116:508–523，2014年。[30] Richard Saurel 和 R´emi Abgrall。用于可压缩多流体和多相流的多相Godunov方法。《计算物理学杂志》，150(2):425–467，1999年。[31] Dale M Snider。用于稠密颗粒流的不可压缩三维多相粒子网格模型。《计算物理学杂志》，170(2):523–549，2001年。[32] Dale M Snider。三项基本颗粒流实验及CPFD预测。《粉体技术》，176(1):36–46，2007年。[33] 孙文军、姜松和徐昆。灰色辐射传输方程的渐近保持统一气体动理学格式。《计算物理学杂志》，285:265–279，2015年。[34] Mo Syamlal。流化多颗粒模型中的颗粒间曳力项。技术报告，EG and G Washington Analytical Services Center, Inc.，美国西弗吉尼亚州摩根敦，1987年。[35] 田宝林、曾俊生、孟宝庆、陈倩、郭晓虎和薛坤。用于气固系统全流型流动的可压缩多相粒子网格法（CMP-PIC）。《计算物理学杂志》，418:109602，2020年。[36] Eleuterio F Toro。《黎曼求解器与流体动力学数值方法：实用导论》。Springer Science & Business Media，2013年。[37] Yutaka Tsuji、Toshihiro Kawaguchi 和 Toshitsugu Tanaka。二维流化床的离散颗粒模拟。《粉体技术》，77(1):79–87，1993年。[38] Vikrant Verma 和 Johan T Padding。一种新颖的MP-PIC方法：用于流化床稠密颗粒流的连续介质颗粒模型。《化学工程科学：X》，6:100053，2020年。[39] 王庆功、Timo Niemi、Juho Peltola、Sirpa Kallio、杨海瑞、陆俊福和魏鲁滨。循环流化床提升管气固流CPFD建模中的粒径分布。《颗粒学》，21:107–117，2015年。[40] 王伟和李静海。采用多尺度CFD方法模拟气固两相流——将EMMS模型应用于亚网格尺度。《化学工程科学》，62(1-2):208–231，2007年。[41] 徐昆。用于Navier–Stokes方程的气体动理学BGK格式及其与人工耗散和Godunov方法的联系。《计算物理学杂志》，171(1):289–335，2001年。[42] 徐昆。从稀薄流到连续介质流态的统一计算流体力学框架。《航空航天工程要素》，剑桥大学出版社，2021年。[43] 徐昆和黄传真。适用于连续流和稀薄流的统一气体动理学格式。《计算物理学杂志》，229(20):7747–7764，2010年。[44] 杨宁、王伟、葛蔚和李静海。采用结构相关曳力系数的循环流化床并流上行气固流CFD模拟。《化学工程杂志》，96(1-3):71–80，2003年。[45] Xiaojian Yang、Xing Ji、Wei Shyy 和徐昆。基于气体动理学通量和HLLC通量的高阶格式性能比较。《计算物理学杂志》，448:110706，2022年。[46] Xiaojian Yang、Chang Liu、Xing Ji、Wei Shyy 和徐昆。统一气体动理学波粒方法VI：分散稀相气固颗粒多相流。《计算物理通讯》，31(3):669，2022年。[47] Xiaojian Yang、Wei Shyy 和徐昆。用于从稀相到稠密固体颗粒极限气固颗粒两相流的统一气体动理学波粒方法。《流体物理学》，34(2):023312，2022年。

[48] Xiaojian Yang、Yufeng Wei、Wei Shyy 和徐昆。用于气固流化床三维模拟的统一气体动理学波粒方法。《化学工程杂志》，453:139541，2023年。[49] Yong Zhang、Ji Xu、Qi Chang、Peng Zhao、王俊武和葛蔚。流化数值模拟：由挑战驱动。《粉体技术》，414:118092，2023年。[50] Yong Zhang、Yuemin Zhao、Liqiang Lu、葛蔚、王俊武和Chenlong Duan。采用离散颗粒方法评估鼓泡流化床粒径偏析的多分散阻力模型。《化学工程科学》，160:106–112，2017年。[51] Wenqi Zhong、Aibing Yu、Guanwen Zhou、Jun Xie 和 Hao Zhang。稠密颗粒反应系统的CFD模拟：方法、最新进展与应用。《化学工程科学》，140:16–43，2016年。[52] Yajun Zhu、Chang Liu、Chengwen Zhong 和徐昆。统一气体动理学波粒方法II：非结构网格上的多尺度模拟。《流体物理学》，31(6):067105，2019年。