

复杂流动多尺度模拟中的粒子方法

葛蔚 麻景森 张家元 唐德翔 陈飞国 王小伟 郭力 李静海

(中国科学院过程工程研究所多相反应实验室, 北京 100080. E-mail: wge@home.ipe.ac.cn)

摘要 复杂流动中的多尺度结构对理论和工程研究都是巨大的挑战, 而多尺度方法也成为其必然的选择. 粒子方法(particle method, PM)是多尺度方法的理想组件和有力的研究手段. 以此为背景, 从拟颗粒模拟出发, 比较了一些粒子方法在模拟中的精度和效率, 综述了不同粒子方法在复杂流动多尺度模拟中的作用, 介绍了基础和应用研究上的一些进展, 并对今后的研究方向进行了展望.

关键词 复杂流动 动力学 多尺度模拟 拟颗粒模拟 粒子方法 传递过程 过程放大

工业过程和自然界的流动现象实际上大多属于复杂流动, 多相流、多组分、湍流和非牛顿流普遍存在. 它们千变万化的行为已成为复杂性研究关注的热点, 并为它提供了非常不错的实验对象. 而同时它们也困扰着相关的工程领域, 使从实验室到工业过程的放大或规模化过程缺乏理论指导和模拟手段. 而在很大程度上, 这种复杂性和尺度效应是复杂流动中动态结构的多尺度性质所决定的. 仅从微观上描述这些结构即使可能也是不经济的, 而仅从宏观上描述显然也是不够的, 这样多尺度方法就自然成为处理这种复杂性的切实手段. 多尺度方法总体上在 20 世纪 90 年代后才引起广泛关注, 目前它的应用也还相当有限. 单尺度方法现在依然流行, 但它们不仅会掩盖所考虑尺度之下结构的效应也会抹平大尺度上的结构, 从而造成显著的误差, 特别是对于那些对结构敏感的传递和反应过程. 按照文献[1]的划分, 多尺度方法大致有 3 种类型: 描述型, 即在同一模拟的不同时空区域采用不同尺度的描述; 关联型, 即由小尺度模拟为上一尺度的模拟提供本构关系; 变分型, 即不同尺度上的模型通过稳定性条件相关联给出系统的总体描述. 按上述顺序, 它们的侧重点也从数值方法转向系统机理的理论阐述. 其中关联型方法的历史相对较长, 如通过分子动力学(molecular dynamics, MD)模拟测量流体物性作为 Navier-Stokes (N-S)方程数值求解的参量来预测多孔介质的渗透率就已体现了它的基本思想. 大涡模拟(large eddy simulation, LES[2])和雷诺应力模型也是这方面的典型实例. 但近来尝试最多的还是描述型方法, 如 MD 模拟与有限元计算相结合描述材料中裂纹的发展[3~5]和微流动过程[6,7]. 变分型方法还很不成熟, 但我们相信它对复杂性研究有着更深远的意义, 当然它的

发展还依赖于通过其他多尺度方法积累的认识. 对气固两相流, 能量最小多尺度模型(energy minimization multi-scale, EMMS[8,1])是这一类型中比较典型的实例.

虽然多尺度方法提供了处理复杂性的一个合理框架, 其成功还依赖于不同尺度上的模型组件的优劣. 对此, 所谓的粒子方法(particle methods, PMs)是很有吸引力的候选组件, 而拟颗粒模拟(pseudo-particle modeling, PPM)[9,10]等方法就是这方面的具体实例. 这将是本文讨论的重点.

1 粒子方法与复杂流动的多尺度模拟

PM 是计算力学和计算化学, 特别是复杂流动模拟的一类新方法. 它们从大量离散粒子的运动和相互作用中重构连续介质的行为. 巧合的是, PM 也建立在不同尺度上, 这至少为它们与多尺度模型的“无缝”耦合提供了结构上的便利. 与描述型方法中传统的粒子-连续介质耦合相比, 采用不同 PM 的粒子-粒子耦合由于物理模型的相近本质而更加自恰和灵活.

在微尺度上, 粒子主要呈现分子属性, 即有显著的热运动并以简单的保守力相互作用. 像压力和黏度这样的连续介质属性需要对许多粒子进行积分统计才能获得. 分子动力学模拟(molecular dynamics, MD[11,12])可能是微观上最早出现的 PM, 现在也可看作是各种 PM 的一个原型. 在宏观上, 粒子可大致被看作物质微元的拉格朗日(Lagrange)表达, 粒子间的应力和能量耗散与它们的状态变量相关. 其典型例子是光滑粒子动力学(smoothed particle hydrodynamics, SPH[13~16]), 移动粒子半隐式方法(moving particle semi-implicit, MPS[17,18])一定意义上也属此类. 而在位于两者之间的介观尺度上, 有耗散粒子动力学

(dissipative particle dynamics, DPD^[19])及其后续发展的一些模型(参见文献^[20,21])。这类粒子既有热运动又耗散能量,大致可认为是分子团的一种物理模型。

PM在多尺度模拟中的作用可用图1来说明。PM最显著的优势是数值方法上的简单性和并行性,特别是对传统连续介质计算流体力学(computational fluid dynamics, CFD)具有挑战性的复杂流动而言,如间断性、自由表面、多体运动边界、大变形、裂纹和非牛顿流等。即便由于VOF(volume of fluid^[22])、ALE(arbitrary Lagrangian-Euler^[23])、虚拟区域(fictitious domain^[24])、界面跟踪(front-tracking^[25,26])和水平集(level set, 参见文献^[27])等技术的发展,经典的有限差分 and 有限元等数值方法已有了长足的进步,PM的方便性依然很有吸引力。对描述型方法来说,PM提供了从微观到宏观不同尺度的统一形式的物理描述手段,将极大地方便这类多尺度方法的具体实现,特别是对与流动耦合的复杂物理化学过程,如流动变形中的相界面上的相变过程。

当然总的来说,PM的计算量都比较大,但对微观和一些介观(如超微颗粒和高聚物胶团等)的结构与行为的描述来说,由于没有“天然”的连续介质模型,它们几乎是自然的选择。实际上随着纳米材料的

广泛应用和微制造技术的出现,工程上对所处理体系的微观和介观特性也越来越关注,已不再局限于传统的颗粒、液滴和气泡表面等的传递和反应过程。可见对关联型方法来说,PM也非常重要,因为上一尺度需要的本构关系来自对下一尺度的封闭的统计描述,但到目前为止理论推导还只在相当简单的系统上取得了成功,如一般气体的状态方程等。这里的一个实质性困难在于:对平衡或准平衡系统来说,这种描述只需要少数几个变量;而对于复杂流动中典型的非线性系统而言,对平衡态的远离使统计行为的自由度,亦即描述中需要的独立变量数急剧增加。这时模拟对于实验的优势在于其结果的任何细节都能详尽而无干扰地加以研究。特别是我们能采用简化或理想的系统进行“数字实验”并依然保证结果具有清楚的物理意义,这样就提供了一条逐步探索复杂性的道路。而这对物理实验来说是不可能或非常昂贵的。

对变分型方法来说,PM也是探索多尺度结构形成的统一机理的有力手段,特别是在微观上。聚式流

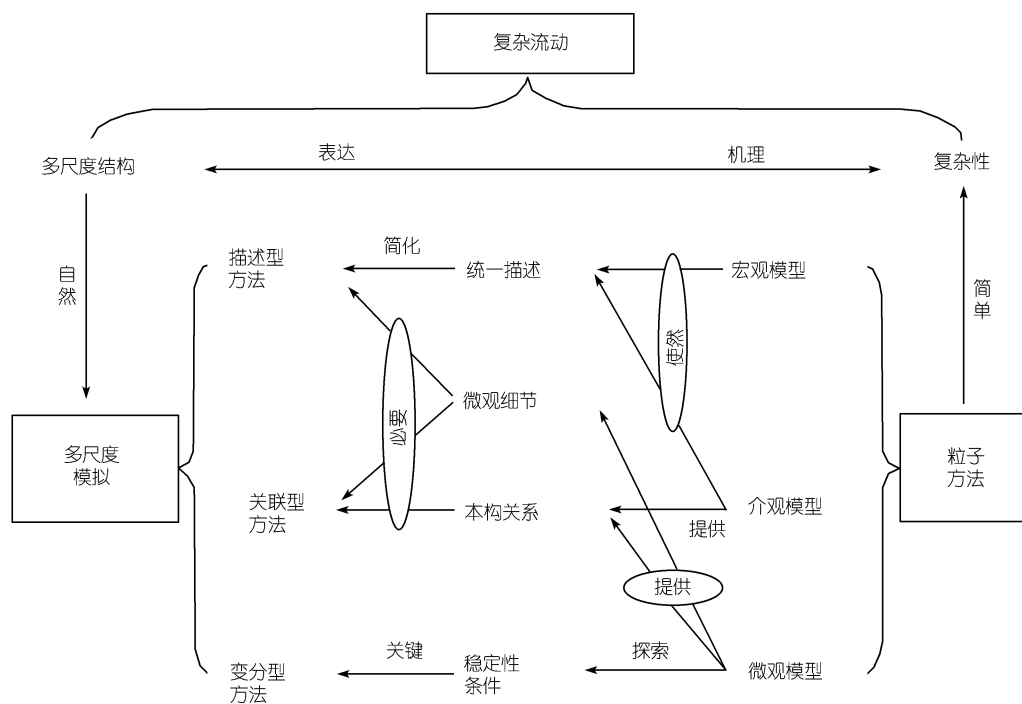


图1 粒子方法在复杂流动多尺度模拟中的作用

态化系统是复杂流动呈现强非线性的典型实例^[28]. 研究该系统的一个显著困难是不同尺度的结构间没有足够的尺度分隔, 从而使统计处理相当困难. 小尺度上的统计性质还存在很大涨落时, 大尺度上的结构已经开始呈现了, 因此关联型多尺度方法难以应用而需要采用变分型方法. 采用 PM, 我们已初步发现颗粒流体系统中宏观上的流体动力学复杂性可以追溯到连续介质假设能够成立的尺度之下^[10,29], 并且在那里已能找到变分型方法所需的稳定性条件^[29].

当然, PM 本来并不是为了探索复杂性或为了构成多尺度方法而提出的, 因此还有很大的改进余地. 我们从 1996 年开始探索 PPM 和宏观拟颗粒模拟 (macro-scale pseudo-particle modeling^[30,31] MaPPM) 正是希望通过结合已有方法的优势找到更适合多尺度模拟的 PM.

2 拟颗粒模拟——探索复杂性的手段

PPM 是结合直接模拟蒙特卡洛 (direct simulation Monte-Carlo, DSMC^[32]; 参见^[33]的评论) 和 MD 模拟提出的一种颗粒流体系统微观模拟方法. 如图 2 所示, 每个拟颗粒 (pseudo-particle, PP) 具有 4 个属性: 质量 (m_i), 直径 (d_i), 位置 ($\mathbf{P}$) 和速度 ($\mathbf{v}$), 其中 m_i 和 d_i 可以是模拟中的常量. 在每一步中, 所有 PP 按统一的时间步长独立运动, 并可能承受外力. 在每一步结束时, 如果两个 PP 间的距离 $|\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2|$ 小于其半径之和 $(d_1 + d_2)/2$, 并且 $\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2$ 和 $\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ 的内积为负, 则它们将像两个刚性圆球一样碰撞, 即

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_{10} - \frac{(1+e) \cdot m_2}{m_1 + m_2} \cdot \frac{(\mathbf{v}_{10} - \mathbf{v}_{20}) \cdot (\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2)}{|\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2|^2} (\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2),$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_{20} - \frac{(1+e) \cdot m_1}{m_1 + m_2} \cdot \frac{(\mathbf{v}_{10} - \mathbf{v}_{20}) \cdot (\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2)}{|\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2|^2} (\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2),$$

其中 e 是恢复系数, 但一般 PP 间的碰撞是完全弹性的, 即取 $e=1$. PP 按新的速度移动到新的位置并以此循环. 碰撞处理的顺序是在算法中预先给定的, 但不能保证它们发生的空间均匀性和各向同性.

2.1 物理背景和与其他 PM 的比较

PPM 对从源头上探索复杂流动的机理是理想的方法. 归根到底, 流动行为的复杂性决定于微观上的两种因素: 大量流体分子的相对位移和相互作用. 作为对文献^[1]指出的复杂系统中普遍特征的印证, 我们注意到: 在两种机制相互竞争因而必定相互协调

时, 复杂结构和复杂行为最容易被观察到, 如乳液系统和所谓的软物质 (包括生物系统); 而如果是分子的位移或者分子间相互作用占主导地位时 (前者如稀薄气体, 后者如单晶体), 在粒子排布上的复杂性就不显著. 大多数 PM 显式地含有这两种机制, 这在数值计算中可视作算子分裂, 但在 PPM 中具有更明确和更简洁的物理意义.

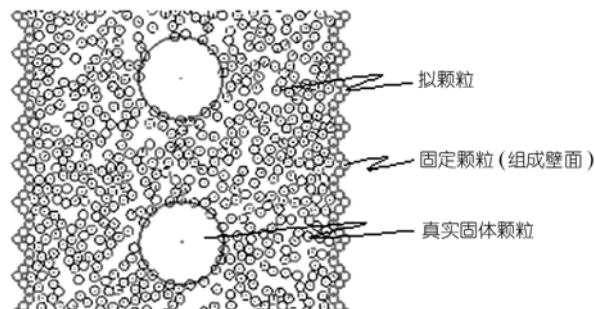


图 2 拟颗粒模拟中的颗粒流体系统

显然, PPM 的碰撞动力学和硬球 MD 的相同, 故其质量、动量和能量守恒都能达到机器的字长精度; 但它的碰撞搜索过程却与软球 MD 的相同, 而硬球 MD 的碰撞搜索过程是相当耗时且难以实现并行处理的. 实际上, 这种处理背后蕴涵的物理模型和 MD 有很大的差别, 而更类似于 DSMC 模型, 但它与 DSMC 的本质区别是后者的碰撞遵循设定的统计规律, 这些规律只在很少的情况才直接反映真实的物理过程, 如稀薄气体. 在其他情况下, 尽管 DSMC 也能正确地复现宏观的流体动力学行为, 但从分子运动形成流动的自然过程却被掩盖了, 代之以一种人为的过程. 对于其他一些 PM 也是这样, 比如在格子波尔兹曼 (LBM^[34]) 和格子气自动机 (LGA^[35]) 中, 微观物理图景的人为简化更加明显. 而 PPM 中的 PP 则可以视为理想的物理粒子, 就像其他常用的模型粒子, 如硬球分子及 Lennard-Jones 分子一样. 其粒子碰撞过程基本上是确定性的, 取决于每个邻近粒子的具体状态, 并且在物理上是合理的. 波尔兹曼方程 (稀薄条件下) 和 H-定理等统计规律也是从更小的尺度上复现出来, 而不是预先设定.

PP 与真实分子在流体动力学行为方面的物理一致性已从不同方面都得到了证实. 定性上, 我们注意到该模型允许速度较快的 PP 在碰撞时相互接近, 这

与具有较高动能的分子碰撞截面收缩非常一致。在稠密气体的平衡态模拟中, PPM成功产生了PP速度自相关函数的长时尾现象^[10], 它表明邻近粒子的速度与位置是相关的, 而这在统计处理中通常认为是相互独立的。这反映出流体在分子尺度上就已经有了明显的流体动力学行为的痕迹。

其他证据来自对PP流体的统计物性, 这也是决定模型有效性的关键问题。这在早已从理论上进行了评价¹⁾, 虽然只是很初步的。最近我们又对此进行了系统的模拟测量, 一些初步的结果已经报道^[36]。图3是在不同强度(g)的重力作用下的平面Poiseuille流随时间的发展过程。其中的无滑移边界条件是通过使PP碰壁原路返回而实现的。正如牛顿流体所表现的那样, 最后的流型呈抛物线型, 测得的动力学黏度(见图4)与平均流速(V_m)无关。图5显示了2D和3D的PP流体的可压缩性因子, 由此可得状态方程的表达式为 $p=4\eta Zv_0^2/\pi$, 其中约化单位量取如下值: $d_f=2$, $m_f=1$, 时间步长 $\Delta t=1$ 。表达式中 v_0 是PP脉动的均方

根速度。基于上述结果, PP流体的性质就可以对应到所模拟的物理流体。虽然为显示更复杂流体的性质, 要给PP粒子加入新的属性, 但我们注意到简单的牛顿流体就足以产生复杂的流动。

2.2 拟颗粒与固体颗粒间的作用方式

作为一种PM, PPM将固体颗粒离散为一群受约束的PP, 它们同样与自由流体PP作用。只是所受的撞击不是“立即生效”, 而是先对整个颗粒求和, 再按刚体动力学分配到每个组成粒子。MD模拟^[37]预示如果这些粒子的排列能形成一定的粗糙度, 无滑移边界条件就能自然满足。但这种方式不能保证动能守恒。另一个办法是直接处理流体PP和表面由受约束的光滑PP组成的固体颗粒的碰撞, 这样固体颗粒的速度、角速度(v_s, ω_s)和流体的速度(v_f)就能由动量、角动量及动能守恒方程解出。

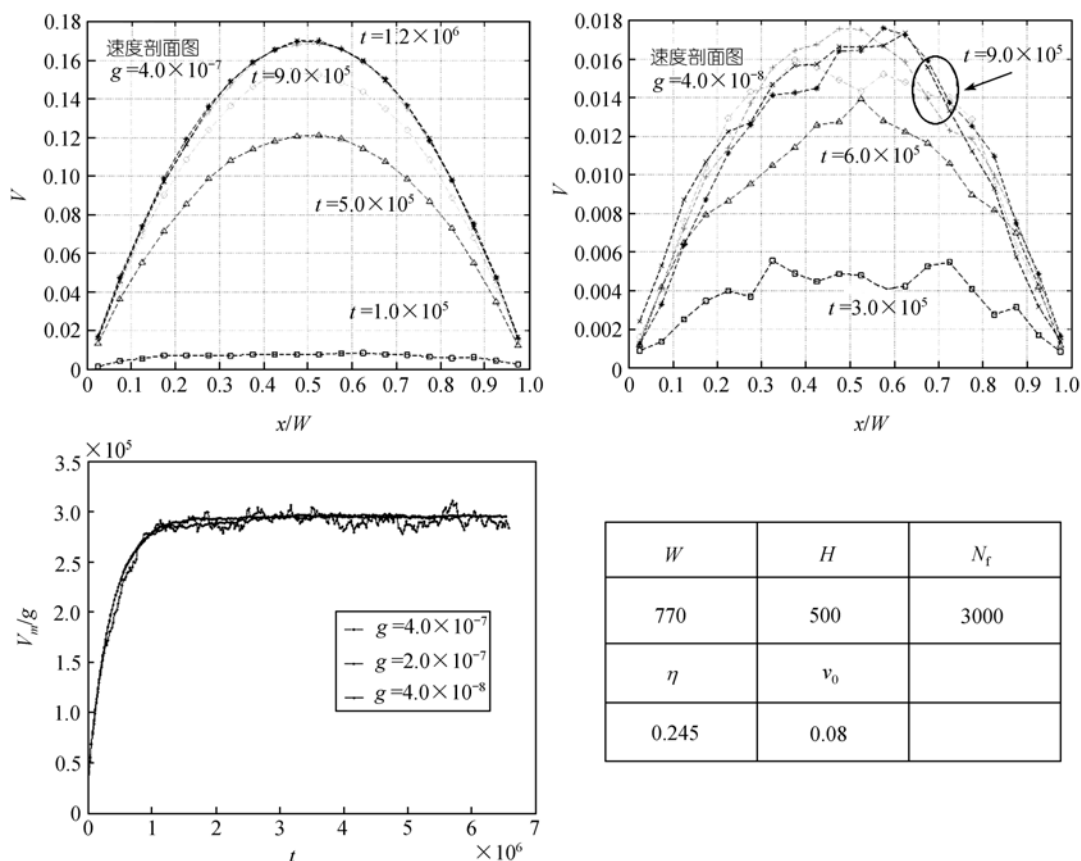


图3 平面 Poiseuille 流形成过程的拟颗粒模拟

1) 葛蔚. 流态化系统的多尺度计算机模拟. 哈尔滨工业大学博士学位论文, 1998

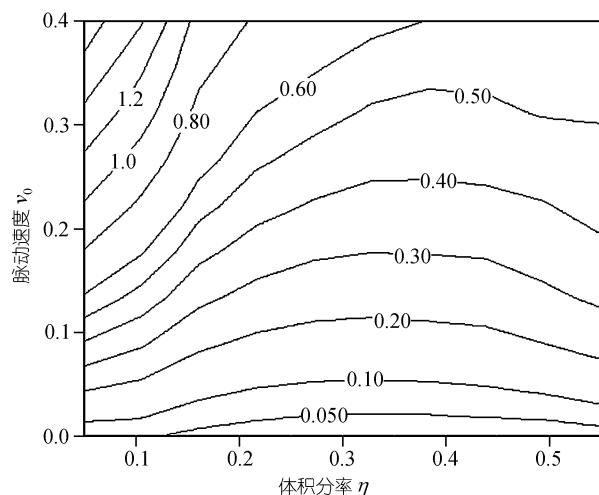


图 4 模拟中测量的PP流体的运动黏度 $\nu_t = \mu_t / \rho_t$

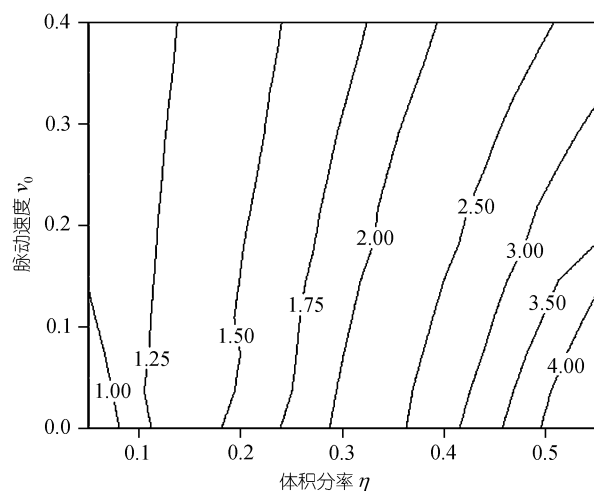


图 5 PP 流体的可压缩性因子

但是要用受约束的PP精确表示颗粒的轮廓, 颗粒必须比流体PP大得多, 可能已明显超过流场描述的精度要求从而增加了计算量. 这时最好还是用光滑曲线描述颗粒的轮廓, 从而必须考虑接触点上的切向力或摩擦力, 以保证无滑移边界条件. 因为流体PP按定义是不带旋转的, 在与颗粒的碰撞中将它们处理为质点是简单而合理的. 这样它们之间的相对速度 $\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_s - \boldsymbol{\omega}_s \times (\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_s)$ 在碰撞前后应该是反对称的, 并能保证动量守恒. 与角动量和动能守恒相结合, 可建立一个封闭的二次方程组, 而它的一个解是 $\boldsymbol{\omega}_{s1} = -\boldsymbol{\omega}_{s0}$, 这是不合理的, 应被排除, 这样两个粒子

碰撞后的速度就能被惟一确定了¹⁾.

实际上, 前面的讨论与多尺度模拟中的一个中心问题——不同尺度间的关联密切相关. 通过无滑移边界条件的合理实现, PP 的微观运动和颗粒的宏观运动就在物理上一致地关联起来了. 所以颗粒流体系统的 PPM 模拟是一种典型的 PM 多尺度计算. 目前正在尝试含有胶体颗粒、复杂聚合物分子和 PP 的三尺度 PM 计算.

2.3 PPM在颗粒-流体系统微观模拟中的应用

进行 PPM 模拟和做物理实验非常相似. 显然, 对这样一个精细的方法, 即便是对单颗粒绕流这样的问题其计算量也是相当大的. 因而, 仔细地挑选和优化模拟参数成了 PPM 模拟计算成功的一个重要因素. 模拟中通常会遇到比可优化的参数更多的约束和限制, 从而不得不忽略或放松一些次要的限制条件. 例如, 对不可压缩流, 只要马赫数 Ma 远小于 1, 其值可以放得很大. 优化的结果通常是 PP 只比固体颗粒小一至二个数量级, 因此, 转换成有量纲值后, PP 要比实际的分子大得多, 就此而言, 它们不是几何和计算意义上的分子. 实际上, 与此优化相对应的物理过程是用一个简单的系统, 即一个粒子数更少的系统, 来模拟真实的系统. 其代价是流动行为的较大涨落和不可避免的计算误差引起的背景噪声的出现. 与连续方法中的数值误差相比, 这种误差具有清晰的物理意义, 它反映了微观尺度上分子随机运动的残余. 由于各种守恒量都保持到机器字长的精度, 误差能得到很好的控制, 因而算法的鲁棒性很好. 只要有足够的计算能力, PP 的大小和模拟误差的降低理论上是没有限制的.

PPM中的拉格朗日处理方式有一个独特优势: 动量传递过程中自然耦合了质量和能量的传递而无需额外的计算. 所有过程都可以从分子水平上进行研究. 然而, 作为一种物理模型, 传质系数是PP的状态函数, 这就在模拟参数的选择时又增加了一个约束, 因而也限制了其应用范围. 一种初步的解决方法是PP除了承担它们在PPM中原有的“任务”外, 还作为每种传递组分的承载体. 每次碰撞的质量传递与两个粒子上每种组分的浓度有关, 比如对粒子(1, 2), 传递量为 $\delta C_{i,1 \rightarrow 2} = k_i(C_{i,1} - C_{i,2})$, 其中 C_i 和 k_i 分别是组分 i 的相对浓度和碰撞质量传递系数. 通过调整

1) 李廷华. 拟颗粒的物性统计及其在颗粒流体系统模拟中的应用. 中国科学院过程工程研究所硕士学位论文, 2004

k_i 可以得到合乎要求的传质速率.事实上,我们最近的尝试表明传热和反应流也可用非常类似的方法.

作为示例,我们模拟了较大颗粒的流化现象,所用气体的密度与常温常压下的空气相近而黏度很高.设传质组分“a”在固体颗粒中的浓度恒为 C_a .流场中 C_a 的动态分布如图6所示.随着组分从固体颗粒表面释放,扩散到流体中并随之对流,该组分逐渐集中到密相中,因为那里的固体颗粒密度较高,滑移速度也较小.这种不均匀实际上降低了整体的传质速率,因为在密相中的浓度梯度小,在稀相中又缺乏供给源,即固体颗粒.但我们也能发现团聚物(如图6中圆圈和箭头所示)引起的两相间强烈的质量交换现象,而这又加强了质量的传递.因此,正是这两种因素的竞争决定了采用流化床能否促进传质过程,这样对预测性模拟来说,抓住详细的动态流动结构就至关重要.

该模拟在装有 1.13 GHz Intel P CPU 的 HP DL360 服务器上完成,每周约能执行 50 万步.由于 PP 的脉动较强烈,每个粒子周围的流场无法得到满意的分辨率,这只能借助并行计算才能实现.但是仅用了 50 万个 PP,就能比较合理地复现固体颗粒的局部行为.实际上,模拟中观察到的 U-型和倒 U-型团聚物在定性上与激光片光源在并流上行气-固流动中

的测量相符^[38].从数值模拟的角度看,这一结果有些出人意料,但从物理的角度看,这自然可以看作是PP在远小于基于分子混沌假设的统计所预测的尺度上已经开始表现出集体行为、或者说流动行为的明显迹象.因此,问题是我们是否能从分子水平上直接解释宏观的流体行为,而不是首先通过连续介质描述.PPM模拟中揭示的接近分子水平的细节,从数值模拟的角度看是导致其效率低下的不受欢迎的副产品,而对这种可能性的探究来说,就变成了其他采用统计处理的PM方法,如DSMC和LBM等,所无法提供的非常有价值的信息.利用这个有力的工具,我们最近检验了EMMS模型中稳定性条件的适用性,并在研究局部和瞬时占主导作用的颗粒和流体运动趋势如何通过形成多尺度不均匀结构达到全局和长期的协调中得到了重要的结果^[29],这为自恰地关联分子和宏观尺度的行为预示了一种有希望的方法.

3 宏观拟颗粒模拟及其他相关粒子方法

如果说微观 PM 更适合研究复杂流动的机理,那么宏观 PM 在大多数情况下为工程应用提供了更直接的接口.它们遇到的困难主要是技术上的,即我们更关心其数值算法的精度、稳定性和效率等.下面的

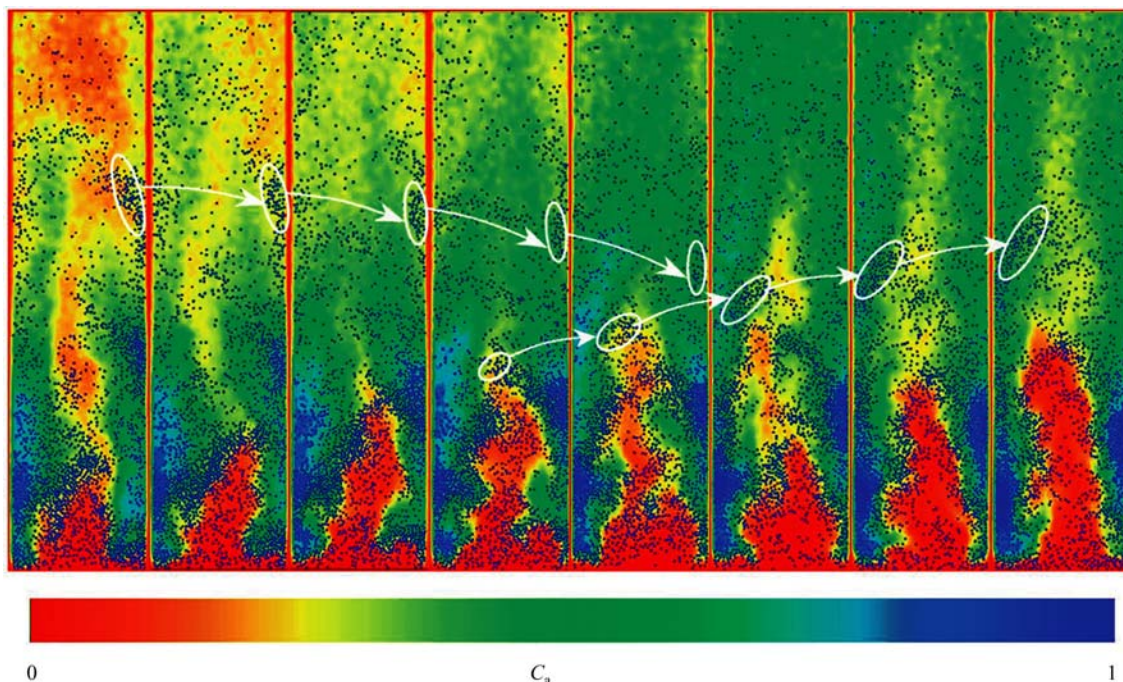


图6 模拟得到的一种从颗粒表面释放的气体组分“a”的分布
截图对应的时间自 $t=3.0 \times 10^6$,每帧间隔为 20000 时间步

讨论将局限于 MaPPM 类型的 PM, 它可以看作对 SPH 的扩展.

MaPPM 的数学基础是将流体力学中所含的算子, 如梯度、散度和 Laplace 算子, 表达为邻近点(粒子)间方向导数可叠加的加权平均形式. 如表 1 所总结的, 由此可系统地推导出许多离散格式. 具体来说, 被加权的函数可以是 f_i , $f_i - f_a$ 或 $f_i + f_a$, 分别记为 I, N 和 P. 其中 f 和 a 分别是所考虑的函数和点, 而 i 表示相邻点. 而权函数, 或称“核”可以被求 0 到 2 阶的导数. 权函数的形式是另一重要因素, 初步研究显示^[39]高阶连续的样条一般是一个不错的选择. 这里我们将对几种典型格式的表现作一比较, 统一采用作用域为 $r = |r_{ai}| < R$ 的 5 段样条为权函数^[40]:

$$W(r) = A \begin{cases} (3-s)^5 - 6(2-s)^5 + 15(1-s)^5 & 0 \leq s < 1 \\ (1-s)^5 - 6(2-s)^5 & 1 \leq s < 2 \\ (1-s)^5 & 2 \leq s < 3, \end{cases}$$

其中 $s=3r/R$, 而 A 是为满足下式而设的归一系数:

$$\int_{r < R} W(\mathbf{r}) d\mathbf{v} = 1.$$

在二维算例中其值为 $63/478\pi$. 但在实际计算中, 这一积分只局限于少量邻近粒子而 $d\mathbf{v}$ 被离散为 m_{fi}/ρ_i .

表 1 MaPPM 中梯度和 Laplace 算子的不同格式

算子	格式	表达式
∇f_a	N0	$D \sum_i \frac{f_{ia}}{\rho_i} \frac{W(r)}{r^2} \mathbf{r}_{ia}$
	N1	$\sum_i \frac{-f_{ia}}{\rho_i} \frac{W'(r)}{r} \mathbf{r}_{ia}$
	I0	$D \sum_i \frac{f_i}{\rho_i} \frac{W(r)}{r^2} \mathbf{r}_{ia}$
	I1	$\sum_i \frac{-f_i}{\rho_i} \frac{W'(r)}{r} \mathbf{r}_{ia}$
	P0	$D \sum_i \frac{f_i + f_a}{\rho_i} \frac{W(r)}{r^2} \mathbf{r}_{ia}$
	P1	$\sum_i \frac{-f_i - f_a}{\rho_i} \frac{W'(r)}{r} \mathbf{r}_{ia}$
$\Delta f_a^{a)}$	MPS	$2D \sum_i \frac{f_{ia} W(r)}{\sum_i r^2 W(r)}$
	MaP	$D \sum_i \frac{(\nabla f)_{ia}}{\rho_i} \cdot \mathbf{r}_{ia} \frac{W(r)}{r^2}$
	SPH	$2 \sum_i \frac{-f_{ia}}{\rho_i} \frac{W'(r)}{r}$

a) Laplace 算子还有许多其他格式, 这里的 3 种格式分别按采用它们的模型命名. MaP 中 $(\nabla f)_{ia}$ 的离散格式为 N0, 但其他格式以后也应能被考虑

为修正数值误差, “核”的归一直接通过设

$$A = 1 / \sum_i W_{ia} \frac{m_{fi}}{\rho_i}$$

实现. 由此获得的各格式的表达式见表 2, 其中 $m_f \equiv 1$, $R \equiv 1$.

将 Navier-Stokes 方程按上述各格式离散后, 流体又被表示为大量粒子, 即宏观拟颗粒(MaPP), 相邻的 MaPP 间有与它们的速度差相关的剪切应力和与密度差相关的正应力, 这分别与连续介质描述中的黏性和压强相对应. 以 N0-SPH 格式为例, 对弱可压缩的正压牛顿流体, MaPP 的运动方程为

$$\begin{aligned} \dot{V} &= g - \frac{c^2}{\rho} \nabla \rho + \nu \Delta V \rightarrow \dot{V}_a \\ &= g - D \frac{c^2}{\rho_a} \sum_i \frac{W_{ai}}{r_{ai}^2} \mathbf{r}_{ia} - 2\nu \sum_i \frac{V_{ia}}{\rho_i} \frac{W'(r)}{r}, \end{aligned}$$

其中 c 是流体的等温声速, $c^2 = p/\rho$. 因此, 与 LES 中的涡方法(vortex methods^[41-43])等其他一些宏观 PM 不同, MaPPM 依然可以被解释为分子从物理上粗粒化的结果^[44], 尽管它起源于对连续的流体力学方程的 Lagrange 型离散. 我们认为对于描述宏微观间有强耦合的复杂物理过程, 如对相界面上的传递过程, 这是一种潜在的优势, 因为这时可能需要不同 PM 间的耦合.

我们通过平面 Poiseuille 流和由均匀重力场驱动无限正交圆柱阵列的绕流对上述模型进行了模拟检验. 每次模拟采用不同的流速、流场大小(W, H)和宏观 PP 直径(d_f). 对后一算例, 模拟的实际上只是流场的最小重复单元. 以前在 MaPPM 的一种特殊形式^[45] (这里命名为 MaP) 的模拟中, 壁面和圆柱由冻结的流体颗粒组成, 无滑移边界条件通过赋予这些粒子镜像速度来保证. 模拟参数和主要结果在图 7 中进行了总结. 模拟结果分别与公认层流分析解和相应的绕流成束圆柱的实验结果进行了比较^[46].

可以发现少量格式在几乎所有算例中都表现较好, 而总体来说大多数模拟中的流速低于理论或实验值, 这归因于数值黏性和非真实的 MaPP 随机脉动造成的较高的有效黏性. 一个不希望看到的性质是, 这种误差看起来是在流动发展到一定程度后突然发生的. 很多情况下平均流速(V_m)会偏离平滑的增长而出现明显的脉动甚至降低. 同时当压力(p)较高时, 流体甚至会表现出一些弹性, 在一些不成功的算例中, 它使 V_m 在零附近波动. 但当剪切率较高时, 如

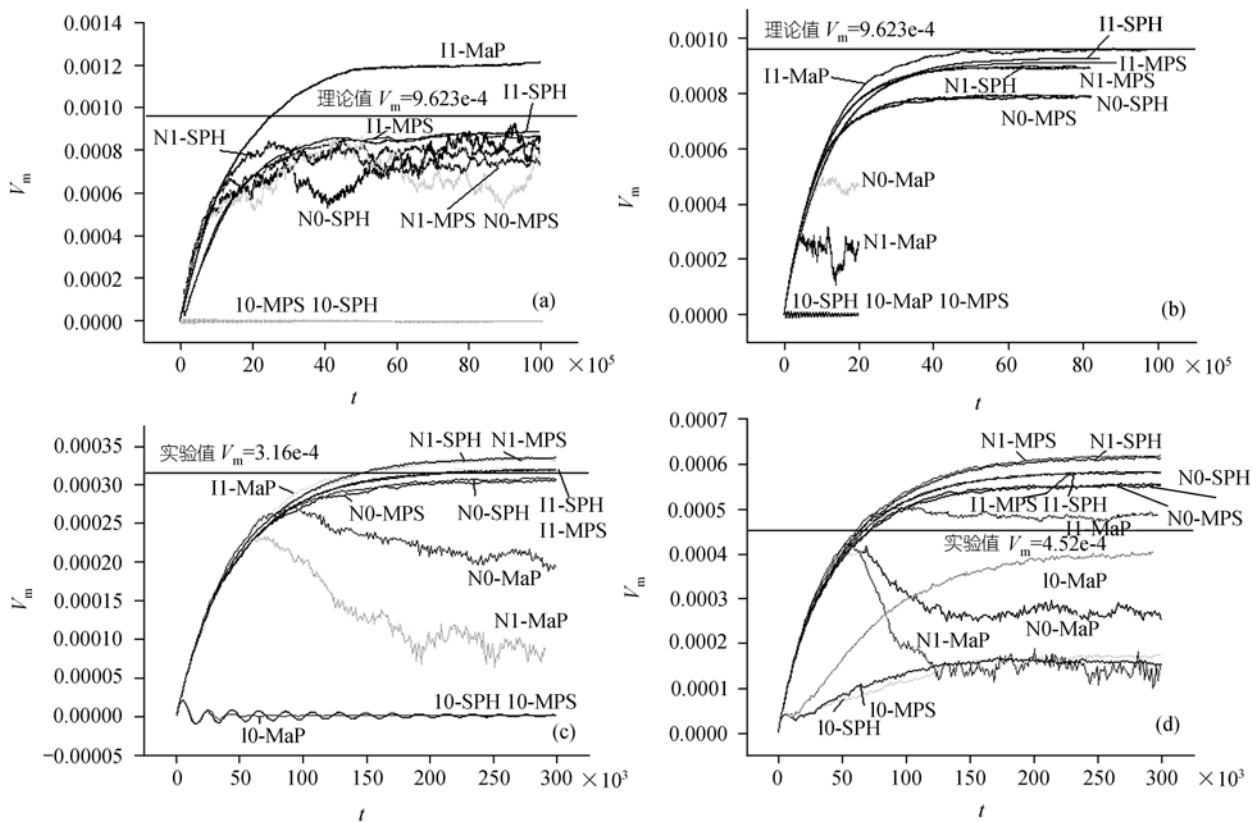


图7 平面Poiseuille流和无限大空间中的圆柱阵列绕流的平均流速(V_m)

不同格式的结果均与理论或实验值(见图中的横线)比较。部分格式的结果因为很差而未列出。(a) 平面Poiseuille流, $H=6$, $W=40$, $d_f=0.4$, $g=1e-9$, $v=1.39e-4$, $p=7.22e-5$; (b) 平面Poiseuille流 $H=6$, $W=20$, $d_f=0.2$, $g=1e-9$, $v=3.46e-5$, $p=2.89e-4$; (c) 圆柱阵列绕流, $H=W=10$, $d_s=6$, $d_f=0.2$, $g=1e-8$, $v=3.46e-5$, $p=2.89e-4$; (d) 圆柱阵列绕流, $H=W=10$, $d_s=6$, $d_f=0.2$, $g=2e-8$, $v=3.46e-5$, $p=2.89e-4$

图7(d)所示,近壁处会发生剪切变薄,而 V_m 会高于理论值。与传统CFD方法一样,这种误差的根源是流体粒子和时间步长的大小有限,而这似乎是无法避免的。

总体上,格式 I1-MaP 比 N1-MPS, N1-SPH 和 N0-SPH 等其他可用的格式稍好一些,尽管其表现与具体算例密切相关。但 I1-MaP 的计算量也明显要高一些,因为 Laplace 算子是从散度间接算得的。实际上我们必须承认,目前对简单流动,宏观 PM 在精度和效率上还远不及传统的 CFD 方法。但与后者得到的大量改进相比,前者还几乎没有被深入研究过,因此可以乐观地估计其未来的发展。例如通过动理学理论可以从物理上对流体离散后的数值误差和有效黏性进行估计。

当然,宏观模拟也可采用介观或微观方法,其中 LBM 和 DPD 是最有竞争力的选择。作为一种基于格

子的方法, LBM 可用简单、守恒、易于并行的算法实现。这种介观粒子尽管具有随机性,但计算效率仍很高。特别是非均匀网格^[47]和多重网格技术^[48]能明显提高计算复杂流动的效率,并已应用到具有工业应用价值的模拟中,如搅拌槽的模拟^[49]。通过大量的格点,它还能简单而又高分辨率地描述复杂的几何形状。但格子方式也带来严重的制约。除了缺乏伽利略不变性, LBM 高效率的另一个代价是在伴随流场计算得到的介观粒子分布信息还不足以复现能代替唯象描述的复杂流动行为的物理机制。例如, LBM 中的表面张力和相变模型并未比传统 CFD 有实质的改进^[50,51]。而对质量、动量和能量传递耦合的问题,特别是当材料物性有显著变化时, LBM 的物理本质还可能使它比纯粹的宏观方法更不灵活。因此尽管气液或液液体系已有多种 LBM 实现^[52,53],它并不是这方面最有优势的方法^[51]。

这些不足对格子方法有共性, 并与非格子方法, 如MaPPM和DPD形成了鲜明对比. 改进的DPD模型^[54,21]的诱人之处是在粒子作用中自恰地引入了热脉动, 这对未知物性的复杂流体和布朗运动等的介观模拟是重要的. 但对简单流体的宏观模拟(未必是简单流动), 没有显式地引入脉动的模型能获得更高的效率和精度, 如MaPPM. 尽管在绕球和绕圆柱等经典的模拟算例中DPD复现了典型的牛顿流体行为^[55], 但直接的模拟参数和流体物性间的精确对应依然相当困难, 特别是对高度非平衡的过程. 实际上, 耗散粒子很难表现出简单的流体物性^[56], 这对广泛的工程应用来说可能是一个主要障碍.

4 粒子模拟的通用并行计算

从实际考虑, 计算量总是各种粒子方法的主要限制. 所幸PM的算法是内在并行的, 即粒子间的作用是局部和可叠加的. 这对空间分解的大规模并行处理(massive parallel processing, MPP)是最合适的, 而且能用优化的通用软件和专门硬件来实现. 它可将最终用户从大量编程工作中解放出来并提高计算效率^[57,45].

对于粒子模拟的通用软件平台, 比较理想的方式是用户可通过脚本描述其应用实例和选用的模型与算法. 它一般是从终端以客户-服务器方式将几何和物理数据以及对问题的其他描述一起传到 MPP 系统上的. 安装在 MPP 系统上的解释器负责解读脚本, 调用前处理程序产生初始数据并分配给各计算节点. 同时动态链接算法与模型库(可采用面向对象设计和模板技术)中的程序框架和模块被当场编译成求解器. 通过这种方法, 平台的通用性和效率均能得到较好的保证. 后处理程序也能在 MPP 系统上并行, 因而可以将分析后的数据传回终端, 这样就减少了网络的负载.

求解器可采用主从模式. 从节点(通常有大量成阵列的节点)负责计算由主节点分配的被模拟系统的某个空间区域. 负载信息和全局统计结果上传到主节点, 主节点然后向从节点发出调整其计算区域或(和)控制操作的指令. 实际上长程作用也可看作是一种特殊的控制方式. 由于负载平衡总会带来相当的通讯和计算开销, 它最好是在负载不平衡性超过一定阈值后再进行, 所以应该不是很频繁的. 为了精确和高效, 可以用矩阵描述从节点内子区域上的负载分布, 而非一个整体的负载信息, 而负载调整的幅度

被圆整到这些子区域的边界上.

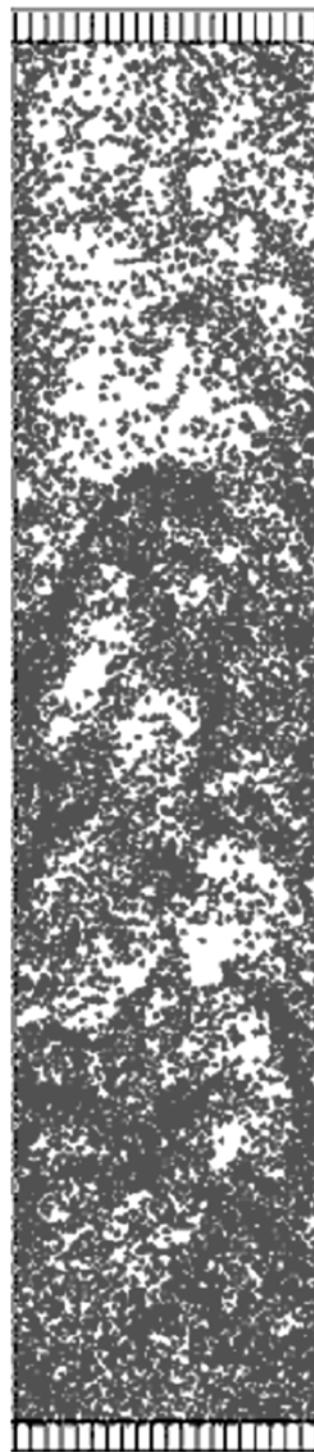


图 8 10^4 个固体颗粒在 2.4×10^6 个拟颗粒组成的流体中流化的拟颗粒模拟

$Re_s=0.83$; $Re=115$ (相对于管壁内径); $\rho_s/\rho_g=443$

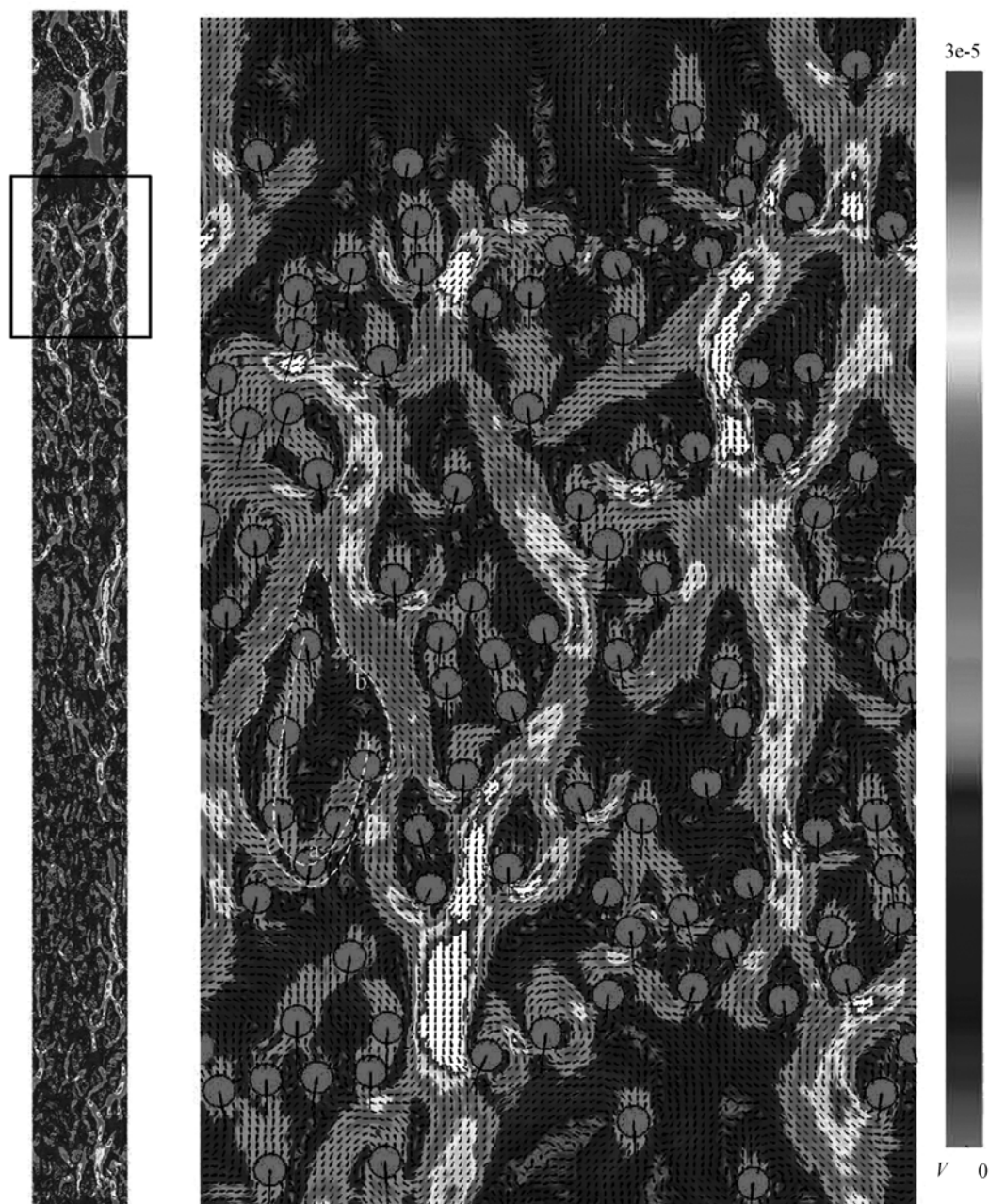


图9 无边界颗粒悬浮的流场细节(原图见文献[58])

左: 整个模拟流场; 右: 加框处的局部放大。从颗粒中心出发的箭头表示颗粒速度的方向, 其长度表示速度模值。流场中的箭头代表其尾部处流速的方向而当地的背景色代表其大小。图中虚线指示: a, 颗粒通过“追尾”现象形成团聚; b, 团聚与稀相的界面

在开发此平台的过程中, 其并行计算的扩展性在PPM和MaPPM模拟中都得到了证实。我们采用PPM模型, 通过16个处理器的一维区域分解并行计算¹⁾, 实现了 10^4 固体颗粒和 10^6 PP的流态化²⁾, 并显

示了实验中能观察到的典型的多尺度结构(图8)。而采用MaPPM模拟了1024个固体颗粒从初始的均匀分布产生团聚的过程, 其中流体由约 5×10^6 个MaPP组成[58]。模拟最多用了1024个处理器, 区域分解的

1) 王小伟, 张家元, 葛蔚, 等. 颗粒流体系统 PPM 模拟的并行计算

2) 张家元. 两相流及颗粒流的离散模拟与应用. 中国科学院过程工程研究所博士学位论文, 2004

粒度很细并采用了动态负载平衡^[59],但其效率仍基本随处理器数目线性增长.图9是文献^[58]中模拟结果的截图,其模拟的分辨率超过双流体模型两个量级以上,亦即图示的整个模拟区域相当于双流体模型处理的一个计算网格.虽然MaPPM目前只在简单流动中定量检验过,但我们发现所模拟的团聚过程是合理的.在第2节我们已采用PPM复现了均匀悬浮失稳后形成团聚物的过程^[10],而现在获得了详细的流场信息后,我们还能比较明确地鉴别出单个的团聚物.如图9中的封闭虚线所示,其界面上流速存在显著的梯度,即团聚物像河流中的沙洲一样被主流区域分割.正如低Reynolds数流体力学^[60]中描述的那样,流动的不稳定性会使后面的颗粒掉进前面颗粒的尾涡中,而这是团聚物形成的典型途径.图9中多处能观察到这个现象,如U形虚线所示处.

对此动态过程的进一步分析能告诉我们更多关于颗粒流体系统中多尺度结构形成机理的信息,并量化这些非均匀结构的统计性质,即本构关系(甚至在宏观尺度之上).而很多传统模拟方法,如双流体模型^[61,62]和离散颗粒模型^[63,64]目前处理的就是这一尺度,但借用了均匀系统中的经验本构关系,如相间电力系数^[65,66].PM正好能用来提高传统方法的精度并将它们引入关联型多尺度方法领域.

5 结论与展望

多尺度结构是复杂系统的显著特征,而相应过程的放大或小型化有必要采用多尺度模拟,粒子方法(PM)是其不同尺度模型的合适选择.

在经典物理学能适用的整个范围内,分子动力学(MD)模型处于最基本的层次,它最适合复杂流体在埃(Angstrom)量级尺度的过程,如聚合物乳液中胶束的形成^[67].而流体力学行为的起源一般可追溯到纳米尺度,对此,直接模拟Monte Carlo(DSMC)和拟颗粒模拟(PPM)分别适合稀薄和稠密的气体,而耗散粒子动力学(DPD)适合复杂流体,如聚合物.连续介质模型不足以描述的微流动^[68]应该是它们很有前景的应用领域.在亚微米尺度,一般要考虑引起布朗运动的分子运动的涨落,对此格子Boltzmann(LBM)和DPD方法从分辨率和效率的平衡上考虑更胜一筹.但问题是在很多情况下这两种方法中蕴涵的介观物理机制对复现典型的流动行为来说分别是太简单或太复杂了,因此它们要在这个尺度上更广泛地应用尚待更多改进.在微米尺度以上传统的流体动力学

描述一般是有效的,因此宏观粒子方法,如MaPPM类型的,对有复杂和动态间断性的流动更有优势,而LBM更适合复杂边界条件下的低Reynolds数流动(如多孔介质中的流动)和颗粒流体悬浮^[69,70].但与传统CFD方法相比,其精度和效率的提高还有很大的潜力待挖掘.

当然一种PM也可用于它不常用的方面.当介观或宏观模拟缺乏合适的本构关系时总是可以借助微观方法.而实际上宏观方法也可应用于微观尺度,因为物理上各种粒子总是可以被看作某种(复杂的)分子并作统计力学处理^[71].这也预示着可能存在一种通过系统地改变一些参数就能应用于多个尺度的广阔范围的“通用粒子”.虽然这一前景还比较遥远,但借用其他PM的优势是改进一种PM、扩大其应用范围的切实途径.如应用DPD的热耗散理论并参考LBM简化粒子间作用很有希望改进MaPPM.而在PP碰撞中引入与相对切向速度相同(而不是通常的相反)的剪切应力可能降低PPM中的有效黏度,从而以类似的计算量模拟更高Reynolds数的现象.当然我们必须注意这些结合不会使模拟和实际参数间的理论对应变得复杂,如在DPD中那样.

总而言之,基于现有的各种PM和更多新方法的加入,多尺度模拟可以找到更方便的方式来无缝地连接或逐级串联不同尺度的模型以实现高效的大规模并行处理,从而最终解决复杂流动模拟的计算量问题,并对其机理有更深入的认识.

致谢 本工作为国家自然科学基金(批准号:20336040和20490201)资助项目和中国科学院知识创新项目(批准号:INF105-SCE-2-07).

参 考 文 献

- 1 Li J, Kwak M. Exploring complex systems in chemical engineering—the multi-scale methodology. *Chemical Engineering Science*, 2003, 58(4-6): 521~535
- 2 Lesieur M, Metais O. New trends in large-eddy simulations of turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1996, 28: 45~82
- 3 E W, Huang Z. Matching conditions in atomistic-continuum modeling of materials. *Physical Review Letters*, 2001, 85: 135501-1~135501-4
- 4 E W, Huang Z. A dynamic atomistic-continuum method for the simulation of crystalline materials. *Journal of Computational Physics*, 2002, 182: 234~261
- 5 Curtin W A, Miller R E. Atomistic/continuum coupling in computational materials science. *Modelling and Simulation in Materials*

- Science and Engineering, 2003, 11: R33~R68
- 6 O'Connell S T, Thompson P A. Molecular dynamics-continuum hybrid computations: A tool for studying complex fluid flows. *Physical Review E*, 1995, 52(6): 5792~5795
 - 7 Garcia A L, Bell J B, Crutchfield W Y, et al. Adaptive mesh and algorithm refinement using direct simulation Monte Carlo. *Journal of Computational Physics*, 1999, 154: 121~134
 - 8 Li J, Kwauk M. Particle-fluid two-phase flow, the energy-minimization multi-scale method. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1994
 - 9 Ge W, Li J. Pseudo-particle approach to hydrodynamics of gas/solid two-phase flow. In Li J, Kwauk M, eds. *Proceedings of the 5th International Conference on Circulating Fluidized Bed*. Beijing: Science Press, 1996. 260~265
 - 10 Ge W, Li J. Macro-scale phenomena reproduced in microscopic systems - pseudo-particle modeling of fluidization. *Chemical Engineering Science*, 2003, 58(8): 1565~1585
 - 11 Alder B J, Wainwright T E. Phase transition for a hard sphere system. *Journal of Chemical Physics*, 1957, 27: 1208~1209
 - 12 Rapaport D C. Microscale hydrodynamics: discrete-particle simulation of evolving flow patterns. *Physical Review A*, 1987, 36(7): 3288~3299
 - 13 Lucy L B. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *The Astronomical Journal*, 1977, 83: 1013~1024
 - 14 Gingold R A, Monaghan J J. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notification of the Royal Astronomy Society*, 1977, 181: 375
 - 15 Monaghan J J. Smoothed particle hydrodynamics. *Annual Review in Astronautics and Astrophysics*, 1992, 30: 543~574
 - 16 Takeda H, Miyama S M, Sekiya M. Numerical simulation of viscous flow by smoothed particle hydrodynamics. *Progress in Theoretical Physics*, 1994, 92: 939~960
 - 17 Koshizuka S, Tamako Y, Oka Y. A paticle method for incompressible viscous flow with fluid fragmentation. *Journal of Computational Fluid Dynamics*, 1995, 4: 29
 - 18 Koshizuka S, Oka Y. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. *Nuclear Science and Engineering*, 1996, 123: 421
 - 19 Hoogerbrugge P J, Koelman J M V A. Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics. *Europhysics Letters*, 1992, 19(3): 155~160
 - 20 Español P. Fluid particle model. *Physical Review E*, 1998, 57: 2930~2948
 - 21 Español P, Revenga M. Smoothed dissipative particle dynamics. *Physical Review E*, 2003, 67: 026705
 - 22 Hirt C W, Nichols B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 1981, 39: 201~226
 - 23 Hu H H. Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures. *International Journal of Multiphase Flow*, 1996, 22: 335~352
 - 24 Glowinski R, Pan T W, Hesla T I, et al. A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 1999, 25: 755~794
 - 25 Unverdi S O, Tryggvason G. A front-tracking method for viscous, incompressible multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 1992, 100: 25~37
 - 26 Tryggvason G, Bunner B, Esameeli A, et al. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, 2001, 169: 708~759
 - 27 Osher S, Fedkiw R P. Level set methods: an overview and some recent results. *Journal of Computational Physics*, 2001, 169: 463
 - 28 Li J, Wen L, Ge W, et al. Dissipative structure in concurrent-up gas-solid flow. *Chemical Engineering Science*, 1998, 53(19): 3367~3379
 - 29 Li J, Zhang J, Ge, W, et al. Variational multi-scale methodology for complex systems. *Chemical Engineering Science*, 2004, 59(8-9): 1687~1700
 - 30 葛蔚, 李静海. 颗粒流体系统的宏观拟颗粒模拟. *科学通报*, 2001, 46(10): 802~805 [摘要] [PDF]
 - 31 Ge W, Li J. Simulation of particle-fluid systems with macro-scale. *Powder Technology*, 2003: 137(1-2), 99~108
 - 32 Bird G A. Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas. *Physics of Fluids*, 1963, 6: 1518~1519
 - 33 Oran E S, Oh C K, Cybyk B Z. Direct simulation Monte Carlo: recent advances and applications. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1998, 30: 403~441
 - 34 Chen S, Doolen G D. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1998, 30: 329~364
 - 35 Boon J P. Statistical mechanics and hydrodynamics of lattice gas automata: an overview. *Physica D*, 1991, 47(1-2): 3~8
 - 36 Ge W, Zhang J, Li T, et al. Pseudo-particle simulation of multi-scale heterogeneity in fluidization. *Chinese Science Bulletin*, 2003, 48(7): 634~636 [摘要] [PDF]
 - 37 Mo G, Rosenberger F. Molecular-dynamics simulation of flow in a two-dimensional channel with atomically rough walls. *Physical Review A*, 1990, 42(8): 4688~4692
 - 38 Horio M, Kuroki H. Three-dimensional flow visualization of dilutely dispersed solids in bubbling and circulating fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 1994, 49(15): 2413~2421
 - 39 Morris J P, Fox P J, Zhu Y. Modeling low Reynolds number incompressible flows using SPH. *Journal of Computational Physics*, 1997, 136: 214~236
 - 40 Schoenberg I J. Contributions to the problem of approximation of equidistant data by analytic functions. *Q Appl Math*, 1946, 4: 45
 - 41 Chorin A J. Discretization of a vortex sheet with an example of roll-up. *Journal of Computational Physics*, 1973, 13: 423~429
 - 42 Leonard A. Vortex methods for flow simulation, *Journal of Computational Physics*, 1980, 37: 289

- 43 Mansfield J R, Knio O M, Meneveau C. Dynamic LES of colliding vortex rings using a 3D vortex method. *Journal of Computational Physics*, 1999, 152: 305~45
- 44 Posch H A, Hoover W G, Kum O. Steady-state shear flows via nonequilibrium molecular dynamics and smooth-particle applied mechanics. *Physical Review E*, 1995, 52(2): 1711~1720
- 45 葛蔚, 李静海. 复杂系统离散模拟的通用化. *科学通报*, 2002, 47(5): 353~356 [摘要] [PDF]
- 46 Satheesh V K, Chhabra R P, Eswaran V. Steady incompressible fluid flow over a bundle of cylinders at moderate Reynolds numbers. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 1999, 77: 978~987
- 47 He X, Luo L S, Dembo M. Some progress in lattice Boltzmann method. Part I. Nonuniform mesh grids. *Journal of Computational Physics*, 1996, 129: 357
- 48 Filippova O, Succi S, Mazzocco F, et al. Multiscale lattice Boltzmann schemes with turbulence modeling. *Journal of Computational Physics*, 2001, 170: 812~829
- 49 Lu Z, Liao Y, Qian D, McLaughlin J B, et al. Large eddy simulations of a stirred tank using the lattice Boltzmann method on a nonuniform grid. *Journal of Computational Physics*, 2002, 181: 675~704
- 50 Grunau D, Chen S, Eggert K. A lattice Boltzmann model for multi-scale fluid flows. *Physics of Fluids A*, 1993, 5(10): 2557~2562
- 51 Nourgaliev R R, Dinh T N, Theofanous T G, et al. The lattice Boltzmann equation method: theoretical interpretation, numerics and implications. *International Journal of Multiphase Flow*, 2003, 29: 117~169
- 52 Shan X, Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Physical Review E*, 1993, 47(3): 1815~1819
- 53 Wagner A J, Yeomans J M. Effect of Shear on Droplets in a Binary Mixture. *International Journal of Modern Physics C*, 1997, 8(4): 773~782
- 54 Serrano M, Español P. Thermodynamically consistent mesoscopic fluid particle model. *Physical Review E*, 2001, 64: 046115-1 ~ 046115-17
- 55 Kim J M, Phillips R J. Dissipative particle dynamics simulation of flow around spheres and cylinders at finite Reynolds numbers. *Chemical Engineering Science*, 2004, 59: 4155~4168 [DOI]
- 56 Marsh C A, Backx G, Ernst M H. Fokker-Planck-Boltzmann equation for dissipative particle dynamics. *Europhysics Letters*, 1997, 38: 411~415 [DOI]
- 57 葛蔚, 李静海. 近程作用离散系统大规模并行模拟概念模型. *计算机与应用化学*, 2000, 17(5): 385~388
- 58 唐德翔, 葛蔚, 王小伟, 等. 颗粒流体系统宏观模拟颗粒模拟的并行算法. *中国科学, B辑*, 2004, 34(3): 243~251 [摘要] [PDF]
- 59 Wang X, Guo L, Ge W, et al. Parallel implementation of macro-scale pseudo-particle simulation for particle-fluid systems-multi-dimensional space- decomposition with dynamic load balancing. *Computers & Chemical Engineering*. In print. 2004.
- 60 Happel J, Brenner H. *Low Reynolds Number Hydrodynamics with Special Applications to Particulate Media* (2nd ed.). Leyden: Noordhoff International Publishing, 1973. 235~280
- 61 Murray J O. On the mathematics of fluidization, part I, Fundamental equations and wave propagation. *Journal of Fluid Mechanics*. 1965, 21, part 3
- 62 Gidaspow D. *Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions with Applications*. San Diego: Academic Press, 1994
- 63 Tsuji Y, Kawaguchi T, Tanaka T. Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. *Powder Technology*, 1993, 77(1): 79~97 [DOI]
- 64 Hoomans B P B, Kuipers J A M, Briels W J, et al. Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: a hard-sphere approach. *Chemical Engineering Science*, 1996, 51(1): 99~108 [DOI]
- 65 Ergun S. Fluid flow through Packed Columns. *Chemical Engineering Progress*, 1952, 48(2): 89~94
- 66 Wen C Y, Yu Y H. *Mechanics of fluidization*. Chemical Engineering Symposium Series, 1966, 62(62): 100~111
- 67 Bruce C D, Berkowitz M L, Perera L, et al. Molecular dynamics simulation of sodium dodecyl sulfate micelle in water: micellar structural characteristics and counterion distribution. *Journal of Physical Chemistry B*, 2002, 106: 3788~ 3793 [DOI]
- 68 Karniadakis G E, Beskok A. *Micro Flows: Fundamental and Simulation*. Berlin: Springer-Verlag, 2002
- 69 Qi D. Simulation of fluidization of cylindrical multiparticles in a three-dimensional space. *International Journal of Multiphase Flow*, 2001, 27: 107~118 [DOI]
- 70 Ladd A J C, Verberg R. Lattice Boltzmann Simulations of particle-fluid suspensions. *Journal of Statistical Physics*, 2001, 104(516): 1191~1251 [DOI]
- 71 Hoover W G. Isomorphism linking smooth particles and embedded atoms. *Physica A*, 1998, 244~254

(2004-11-27 收稿, 2005-01-27 收修改稿)