



DOI: 10.16085/j.issn.1000-6613.2024-1801

基于格子 Boltzmann 方法的吸热反应双颗粒沉降模拟

宋祎祺^{1,2}, 李雪¹, 叶茂¹, 刘中民^{1,2}(¹ 中国科学院大连化学物理研究所, 辽宁 大连 116023; ² 中国科学院大学, 北京 100049)

摘要: 双颗粒沉降问题是研究颗粒两相流系统流体力学行为的经典算例。为探究反应过程中热对流的影响, 本文采用浸入边界-格子 Boltzmann 方法对耦合化学反应的催化剂双颗粒沉降过程进行了直接数值模拟, 研究中低格拉晓夫数 Gr 下吸热反应对颗粒-流体间相互作用和颗粒运动行为的影响。结果表明, 反应颗粒的沉降运动受颗粒雷诺数 Re 、 Gr 和达姆科勒数 Da 的协同影响。由于热流体中发生吸热反应的颗粒所受热浮力与重力方向一致, 随着 Gr 的增加, 颗粒沉降速度增加, 两颗粒出现横向振荡行为, 并在热对流的作用下相互远离。根据颗粒 Re 的大小, 颗粒运动模式可以分为三个阶段, 随着 Re 的增大, 热对流的影响逐渐减弱, 颗粒惯性作用占主导。 Da 主要影响颗粒周围的热对流, 当颗粒表面发生快速反应时, 颗粒周围流体温度梯度增大, 颗粒-颗粒间相互作用增强。

关键词: 浸入边界格子 Boltzmann 方法; 流体力学; 颗粒流; 传热

中图分类号: O359

文献标志码: A

文章编号: 1000-6613 (2025) 05-2984-13

Particle-resolved lattice Boltzmann simulations for sedimentation of catalyst particles with endothermic reaction

SONG Yiqi^{1,2}, LI Xue¹, YE Mao¹, LIU Zhongmin^{1,2}

(¹ National Engineering Research Center of Lower-Carbon Catalysis Technology, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116021, Liaoning, China; ² University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: The knowledge on the sedimentation of double particles is important in particulate two-phase flows research. In this work, the sedimentation process of dual catalyst particles coupled with chemical reactions was numerically investigated by a particle-resolved immersed boundary-lattice Boltzmann method (IB-LBM) with multiple-relaxation-time scheme. The effects of endothermic reactions on particle hydrodynamic behavior and particle-fluid interaction under medium and low Grashof numbers (Gr) were studied. The results showed that the hydrodynamic behavior of settling reactive particles was influenced by the synergistic effects of particle Gr , Reynolds number (Re), and Damköhler number (Da). For the catalyst particles with surface endothermic reaction, the thermal buoyancy was in the same direction as gravity. With the increase of Gr , the vertical velocity increased, and then the two separated and settled into a more or less fixed longitudinal separation under the effect of thermal convection. In the meantime, both the two particles oscillated laterally with the same frequency. Depending on the magnitude of particle

收稿日期: 2024-11-06; 修改稿日期: 2024-12-03。

基金项目: 国家自然科学基金(22108269, 22293024, 22293021); 大连化学物理研究所创新研究基金(I202238)。

第一作者: 宋祎祺(1998—), 女, 博士研究生, 研究方向为化工多相流数值模拟。E-mail: songyiqi@dicp.ac.cn。

通信作者: 李雪, 副研究员, 硕士生导师, 研究方向为化工多相流测量与数值模拟。E-mail: lixue@dicp.ac.cn。叶茂, 研究员, 博士生导师, 研究方向为催化反应工程、多相流模拟与测量和人工智能与机器学习。E-mail: maoye@dicp.ac.cn。

引用本文: 宋祎祺, 李雪, 叶茂, 等. 基于格子 Boltzmann 方法的吸热反应双颗粒沉降模拟[J]. 化工进展, 2025, 44(5): 2984-2996.

Citation: SONG Yiqi, LI Xue, YE Mao, et al. Particle-resolved lattice Boltzmann simulations for sedimentation of catalyst particles with endothermic reaction[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2025, 44(5): 2984-2996.

Re , the particle motion mode can be divided into three regimes. With the increase in Re , the effect of thermal convection decreased gradually with the increase of the particle inertia. Da impacted the thermal convection around the particles, leading to an increase in temperature gradient of the fluid surrounding the particles and an enhancement in particle-particle interaction.

Keywords: immersed boundary-lattice Boltzmann method; hydrodynamics; granular flow; heat transfer

颗粒两相流在自然界和工业过程中广泛存在，尤其是在工业催化过程中，深入理解催化剂颗粒两相流对于提高反应速率和关键化学品产量具有至关重要的作用^[1]。对于流化床内的非均相催化反应，如甲醇制烯烃（methanol to olefins, MTO）^[2]、流化催化裂化（fluid catalytic cracking, FCC）^[3]等，反应过程中颗粒-流体、颗粒-颗粒和颗粒-壁面之间存在着复杂的相互作用，主导了颗粒两相流系统的动力学行为，这直接影响催化剂的分布和催化活性，进而影响到整个催化过程的效率和可持续性。许多研究者通过实验和数值模拟的方法，对反应器中的颗粒两相流系统进行了研究，但往往只能通过统计平均值的方法研究其整体行为^[4-6]，缺乏对单个颗粒尺度上颗粒运动行为和流固相互作用的理解。而颗粒全求解的数值模拟方法，有利于深入研究反应过程中催化剂颗粒与流体间相互作用机制，为反应器的设计、调控提供理论基础。

对于流化床反应器内的颗粒两相流研究，常采用颗粒沉降、颗粒绕流等经典流体问题。其中，颗粒沉降涉及到颗粒运动过程，对理解催化剂颗粒的运动行为^[7]具有重要意义。对于单颗粒沉降过程，颗粒的运动行为受到自身颗粒特性、周围流体的流变特性和两相间的传热传质等输运过程的强烈影响。当通道内存在多个颗粒一起运动时，颗粒-流体、颗粒-壁面以及颗粒-颗粒间复杂的相互作用，主导了颗粒两相流系统的动力学行为。最为典型的研究算例就是管道内沉降的两颗粒，在相互作用的影响下会发生牵引（drafting）、接触（kissing）和翻滚（tumbling）现象，即“DKT”现象。该现象最早由 Joseph 等^[8]通过实验观察到，随后许多研究者采用数值模拟的方法复现了这一现象，并探究了影响两颗粒运动行为的因素。

Feng 等^[9]采用有限元法（finite element method, FEM）研究了竖直通道中两个等温圆形颗粒在重力作用下的沉降行为，发现只有当雷诺数 Re 足够大时才会发生 DKT 现象。Aidun 和 Ding^[10]采用格子 Boltzmann 方法（lattice Boltzmann method, LBM），

进一步模拟了低 Re 下的双颗粒沉降过程，发现在 Re 为 2~6 的范围内，颗粒运动会经历复杂的转变。Nie 等^[11]模拟了在 $5 \leq Re \leq 35$ 范围内不同密度的两颗粒的沉降过程，并在不同 Re 和密度比下观察到稳态、周期状态和单独沉降状态三种沉降行为。Ghosh 和 Kumar^[12]模拟了不同尺寸和密度的双颗粒沉降过程，进一步证实了颗粒的粒径比和密度差会决定 DKT 现象的发生。由此可见，颗粒 Re 即惯性效应对于流体中的颗粒运动行为至关重要。

上述双颗粒沉降运动行为的研究大多局限于等温情况，而事实上，由于化学反应等原因，颗粒常与周围流体间存在温差，进而导致颗粒和流体之间的传热现象。其沉降过程受自然对流和强制对流之间的竞争控制，进而影响边界层分离、涡脱落和尾流的动力学。许多研究工作已证明在颗粒两相流系统中，热对流会影响颗粒与流体之间的相互作用。Gan 等^[13]采用任意 Eulerian-Lagrangian 法对耦合传热的双颗粒沉降过程进行了模拟，证明了颗粒间的相互作用受热对流影响的尾流行为所支配。对于热流体中的冷颗粒，颗粒倾向于相互排斥，而冷流体中的热颗粒则更倾向于相互吸引。Feng 和 Michaelides^[14]采用浸入边界法（immersed boundary method, IBM）研究了非等温颗粒的沉降过程，并发现颗粒所受曳力依赖于颗粒的 Re 和格拉晓夫数 Gr 。对于单个颗粒，在中低 Re ($0 < Re < 60$) 下，颗粒与流体之间的热对流使得冷颗粒的曳力系数降低，热颗粒的曳力系数增加。Eshghinejadfar^[15]通过浸入边界格子 Boltzmann 方法也观察到了类似的现象，相较于热颗粒，冷颗粒的沉降速度更快。此外，不同程度的热浮力效应可能会导致颗粒的下沉或上浮。Yang 等^[16]研究了热对流对双颗粒运动行为的影响。对比等温颗粒，热对流增强了颗粒运动轨迹的波动，冷颗粒 DKT 现象会提前发生。从以上研究中可以发现，在考虑传热过程时，热对流改变了颗粒受力情况，颗粒运动和流体流动状态相互影响，与等温颗粒沉降过程存在显著差异。但到目前为止，反应热对颗粒运动的影响少有报道，反应过程中的热对流过程仍需细致而具体的研究。

同样, 化学反应和传质过程的引入也会影响颗粒运动行为。Liu 等^[17]通过实验研究了化学反应对颗粒波动运动的影响, 发现气态产物的不均匀释放直接影响颗粒运动。Zhang 等^[18]利用浸入边界法研究了颗粒的燃烧过程, 发现与惰性颗粒相比, 化学反应增加了颗粒所受曳力。Ou 等^[19]研究了超临界水煤气化过程, 并进一步揭示了影响反应颗粒附近的相间传热/传质的主要机制。Zhao 和 Xu^[20]模拟了两颗粒在腐蚀性液体中并行沉降过程, 分析了反应对颗粒水平运动的影响。这些结果表明, 颗粒-流体间相互作用受到颗粒表面反应的强烈影响。上述研究主要集中在燃烧、溶解等反应活性颗粒, 对于非均相催化反应的研究较少, 颗粒尺度下催化剂颗粒的运动行为仍有待研究。

综上所述, 受颗粒自身特性、传热过程和化学反应等因素的影响, 颗粒运动和流体流动行为存在较大差异, 需要进一步研究。本文采用浸入边界格子 Boltzmann 方法, 耦合化学反应和传热过程, 在颗粒尺度下研究发生吸热反应时催化剂颗粒的沉降行为。通过讨论反应和热对流的影响, 加深了对复杂体系下催化剂颗粒与流体间相互作用机制的理解, 为工业过程中颗粒两相流运动行为的调控提供了理论基础。

1 数值方法

1.1 问题描述

本工作研究了二维圆形颗粒在矩形通道中的沉降运动。如图 1 所示, 通道长度为 H , 宽度 L , 内部充满了密度为 ρ_f 的不可压缩牛顿流体。通道底部和左右两壁面温度保持 $T_c=0$ 不变。顶壁面是绝热的 ($\partial T / \partial x = 0$), 且通道内流体的初始温度 $T_h=1$ 。在通道内引入两个直径为 d_p 、密度为 ρ_s 的催化剂颗粒, 从通道中心处在重力的作用下自由下落, 且在沉降过程中颗粒周围流体发生吸热反应。该问题包含流体流动、传热、传质和化学反应四个过程, 反应流体的流动由 Navier-Stokes 方程、能量方程和对流扩散方程 (convection-diffusion equations, CDEs) 共同描述, 如式(1)~式(4)所示。

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho_f \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{F} \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \alpha \nabla^2 T + Q \quad (3)$$

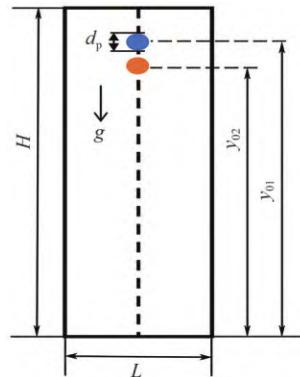


图 1 二维圆形颗粒在矩形通道中的沉降运动示意图

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C_i = D \nabla^2 C_i + J \quad (4)$$

式中, \mathbf{u} 为宏观速度; t 为时间; p 为压力; μ 为动力黏度; α 为热扩散系数; D 为质量扩散系数; ρ_f 为流体密度; T 为温度; C_i 为组分 i 的浓度; Q 为热源项; J 为反应源项; \mathbf{F} 是体积力项, 包含了热浮力项 \mathbf{F}_B , \mathbf{F}_B 由热流体流动研究中常用的 Boussinesq 近似得到, 假设温度变化只影响体积力项中的流体密度 ρ_f , ρ_f 的计算如式(5)所示。

$$\rho_f = \rho_0 [1 - \beta(T - T_0)] \quad (5)$$

式中, β 为热膨胀系数; ρ_0 为参考温度为 $T_0=T_h$ 时对应的流体密度。

进而可得, 在重力场中的热浮力 \mathbf{F}_B , 见式(6)。

$$\mathbf{F}_B = -\rho_0 g \beta (T - T_0) \quad (6)$$

式中, g 为重力加速度。

系统的特征长度 L_{ref} 和特征速度 U_{ref} 定义为颗粒

$$直径 d_p 和终端沉降速度 $U = \sqrt{\pi \frac{d_p}{2} (\rho_s - \rho_f) / \rho_f g}$ 。$$

进而通过对控制方程的量纲为 1 化引入式(7)~式(12)量纲为 1 的参数。

$$\rho_r = \frac{\rho_s}{\rho_f} \quad (7)$$

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad (8)$$

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad (9)$$

$$Re = \frac{U_{ref} L_{ref}}{\nu} \quad (10)$$

$$Gr = \frac{g \beta (T_h - T_c) L_{ref}^3}{\nu^2} \quad (11)$$

$$Da = \frac{k_r L_{ref}}{D} \quad (12)$$

式中, ν 为运动黏度; g 为 g 的数值大小; k_r 为反应物的反应速率常数。

本工作中设定普朗特数为 $Pr=1.0$, 施密特数为

$Sc=0.7$ 。 Re 取决于颗粒与流体密度比, 表示沉降产生的强制对流, 也就是流动惯性的强弱; Gr 影响热膨胀系数, 表示热浮力效应导致的自然对流的强弱; 达姆科勒数 Da 取决于反应速率, 表示反应速率的快慢。

对于反应传质过程考虑一个简化的催化体系, 其中假设: ①反应物和生成物均为流体相; ②反应物和生成物的摩尔数基本保持一致; ③颗粒表面反应为扩散控制。所采用的反应模型为学习模型, 则吸热反应方程式可描述为式(13)。



在颗粒表面的能量和反应边界分别为式(14)和式(15)。

$$-\alpha \frac{\partial T}{\partial n} = \frac{Q_{re}}{\rho_f c_p} \quad (14)$$

$$-D \frac{\partial C_r}{\partial n} = J_{re}(X_b, t) = k_r C_{A,t} \quad (15)$$

式中, $Q_{re} = k_r C_{A,t} \Delta H$, 为 t 时刻反应消耗的总能量, 其中 $\frac{\Delta H}{\rho_f c_p} = 1.0$; $C_{A,t}$ 为 t 时刻的反应物浓度。

1.2 多松弛时间格子 Boltzmann 方法

本工作采用多松弛时间格子 Boltzmann (multiple-relaxation-time LB, MRT-LB) 模型, 同时使用三个分布函数分别描述速度场、温度场和浓度场。相比于单松弛时间 (single-relaxation-time, SRT) 模型, MRT 模型在求解 CDEs 时, 具有更好的精度和稳定性。

1.2.1 速度场

速度场的格子 Boltzmann 演化方程见式(16)~式(18)。

$$\begin{aligned} f_i(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{r}, t) = \\ -\mathbf{M}^{-1} S [m_i(\mathbf{r}, t) - m_i^{eq}(\mathbf{r}, t)] + \delta_t \mathbf{M}^{-1} \left(I - \frac{S}{2} \right) \mathbf{M} F_i(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (16)$$

$$m_i(\mathbf{r}, t) = \mathbf{M} f_i(\mathbf{r}, t) \quad (17)$$

$$m_i^{eq}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{M} f_i^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (18)$$

式中, $f_i(\mathbf{r}, t)$ 为网格点 \mathbf{r} 处的流体粒子分布函数; \mathbf{M} 为正交变换矩阵, 用于将分布函数由物理空间转换至矩空间, 得到 $m_i(\mathbf{r}, t)$; S 为对角弛豫矩阵; \mathbf{F}_i 为外力项的离散形式。

对于速度场的求解, 采用 D2Q9 离散模型, 当格子速度满足 $c = \delta_s / \delta_t = 1$ 时, \mathbf{M} 和 S 的取值为式(19)和式(20)。

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (19)$$

$$S = \text{diag} \left(1.0, \frac{1}{\tau_f}, 1.2, 1.15, 1.0, 1.15, \frac{1}{\tau_f}, \frac{1}{\tau_f} \right) \quad (20)$$

式中, τ_f 为松弛因子, 与黏度有关。

对于 D2Q9 离散模型, 流体粒子的离散速度 \mathbf{e}_i 为式(21)。

$$\mathbf{e}_i = \begin{cases} (0,0) & i = 0 \\ c \left\{ \cos \left[(i-1) \frac{\pi}{2} \right], \sin \left[(i-1) \frac{\pi}{2} \right] \right\} & i \in \{1, 2, 3, 4\} \\ \sqrt{2} c \left\{ \cos \left[(2i-1) \frac{\pi}{4} \right], \sin \left[(2i-1) \frac{\pi}{4} \right] \right\} & i \in \{5, 6, 7, 8\} \end{cases} \quad (21)$$

f_i 的平衡态粒子分布函数 $f_i^{eq}(\mathbf{r}, t)$ 表示为式(22)。

$$f_i^{eq}(\mathbf{r}, t) = \omega_i \rho_f \left[1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] \quad (22)$$

式中, 格子声速 $c_s = 1/\sqrt{3}$, 权重系数 ω_i 为式(23)。

$$\omega_i = \begin{cases} 4/9 & i = 0, \\ 1/9 & i \in \{1, 2, 3, 4\} \\ 1/36 & i \in \{5, 6, 7, 8\} \end{cases} \quad (23)$$

流场中的密度、速度等宏观量可定义为式(24)、式(25)。

$$\rho_f = \sum_i^8 f_i \quad (24)$$

$$\rho_f \mathbf{u} = \sum_i^8 \mathbf{e}_i f_i + \frac{\delta_t}{2} \mathbf{F} \quad (25)$$

1.2.2 温度场

本工作为低速流动 ($Ma < 0.3$) 的情况, 流体可看作不可压缩。根据文献报道经验以及模拟验证的结果, 采用 D2Q9 离散模型求解温度场更为准确, 温度场的演化方程^[21]如式(26)~式(28)。

$$h_i(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - h_i(\mathbf{r}, t) =$$

$$-\mathbf{M}^{-1} S [m_{h,i}(\mathbf{r}, t) - m_{h,i}^{eq}(\mathbf{r}, t)] + \delta_t \mathbf{M}^{-1} \left(I - \frac{S_h}{2} \right) \mathbf{M} Q_i(\mathbf{r}, t) \quad (26)$$

$$m_{h,i}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{M} h_i(\mathbf{r}, t) \quad (27)$$

$$m_{h,i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{M} h_i^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (28)$$

式中, $h_i(\mathbf{r}, t)$ 为网格点 \mathbf{r} 处的温度分布函数; Q_i 为热源项的离散形式。 $S_h = \text{diag} \left(0, 1.0, 1.2, \frac{1}{\tau_h} \right)$,

$1.15, \frac{1}{\tau_h}, 1.15, 1.0, 1.0$), τ_h 与热扩散系数相关。 h_i 的

平衡态温度分布函数 $h_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)$ 选取如式(29)。

$$h_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} \omega_i \rho_f T \left[-\frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] \\ \omega_i \rho_f T \left[1.5 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{2c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] \\ \omega_i \rho_f T \left[3.0 + \frac{2\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] \end{cases} \quad (29)$$

流体温度可由式(30)计算。

$$\rho_f T = \sum_i^8 h_i + \frac{\delta_t}{2} Q \quad (30)$$

1.2.3 浓度场

在对流相对较弱且边界效应显著的情况下, 对于存在曲面几何和具有 Neumann 边界的扩散问题, Li 等^[22]的研究证明, D2Q5 离散模型求解具有更高的精度和更好的收敛性。因此, 本工作采用 D2Q5 离散模型求解浓度场, 演化方程^[23]为式(31)~式(33)。

$$g_i(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \delta_r, t + \delta_t) - g_i(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{M}_g^{-1} \mathbf{S}_g [m_{g,i}(\mathbf{r}, t) - m_{g,i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] + \delta_t \mathbf{M}_g^{-1} \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{S}_g}{2} \right) \mathbf{M}_g J_i(\mathbf{r}, t) \quad (31)$$

$$m_{g,i}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{M}_g g_i(\mathbf{r}, t) \quad (32)$$

$$m_{g,i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{M}_g g_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) \quad (33)$$

式中, $g_i(\mathbf{r}, t)$ 为网格点 \mathbf{r} 处的浓度分布函数, J_i 为反应源项的离散形式。 $\mathbf{S}_g = \text{diag} \left(0, \frac{1}{\tau_g}, \frac{1}{\tau_g}, 1.0, 1.0 \right)$, τ_g 与质量扩散系数相关。

对于 D2Q5 离散模型, \mathbf{M}_g 取值为式(34)。

$$\mathbf{M}_g = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ -4 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (34)$$

流体粒子的离散速度 \mathbf{c}_i 为式(35)。

$$\mathbf{c}_i = \begin{cases} (0,0) & i = 0 \\ c \left\{ \cos \left[(i-1) \frac{\pi}{2} \right], \sin \left[(i-1) \frac{\pi}{2} \right] \right\} & i \in \{1,2,3,4\} \end{cases} \quad (35)$$

相应 g 的平衡态分布函数 $g_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)$ 表示为式(36)。

$$g_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = j_i C_i \left[1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] \quad (36)$$

其中, 权重系数 j_i 为式(37)。

$$j_i = \begin{cases} 1/3 & i = 0 \\ 1/6 & i \in \{1,2,3,4\} \end{cases} \quad (37)$$

流场中组分 i 的浓度可由式(38)计算。

$$C_i = \sum_i^8 g_i + \frac{\delta_t}{2} J \quad (38)$$

1.3 颗粒流体相互作用的模拟方法

1.3.1 流体中的颗粒运动方程

颗粒的运动行为由牛顿运动定律给出, 即式(39)、式(40)。

$$\frac{d\mathbf{U}_p}{dt} = \frac{1}{M_p} \mathbf{F}_p + \frac{\rho_s - \rho_l}{\rho_s} g + \frac{1}{M_p} \mathbf{F}_{\text{col}} \quad (39)$$

$$\frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \frac{1}{I_p} \mathbf{T}_p \quad (40)$$

式中, \mathbf{U}_p 和 $\boldsymbol{\omega}_p$ 为颗粒的平动和转动速度; M_p 和 I_p 为颗粒的质量和转动惯量; \mathbf{F}_p 和 \mathbf{T}_p 为颗粒所受流体的作用力和扭矩。 \mathbf{F}_{col} 为颗粒-颗粒间或颗粒-壁面间碰撞产生的力, 其模型^[24-25]为式(41)。

$$\mathbf{F}_{\text{col}} = \begin{cases} \frac{k}{\varepsilon} \left[\frac{\|\mathbf{w}\| - (R_1 + R_2) - \xi}{\xi} \right]^2 \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|} & \|\mathbf{w}\| \leq (R_1 + R_2 + \xi) \\ 0 & \|\mathbf{w}\| > (R_1 + R_2 + \xi) \end{cases} \quad (41)$$

式中, $\mathbf{w} = 2(X_{p,1} - X_{p,2})$ 为两颗粒间的距离矢量; R_1 和 R_2 为颗粒半径; k 和 ε 分别为作用力和刚性的放缩因子。当颗粒-颗粒间或颗粒-壁面间的间隙小于阈值 ξ 时, 施加 \mathbf{F}_{col} 的作用, 本工作中 ξ 设置为一个网格长度。

1.3.2 基于浸入边界法的颗粒边界处理

颗粒的移动边界采用浸入边界法^[25-26]进行处理。如图 2 所示, 流场通过 Euler 法描述, 采用均匀的笛卡尔网格离散, 并将流-固边界曲线 Γ 描述为一组浸入流体中的 Lagrangian 点, 流体流动与颗粒边界之间的相互作用作为源项添加至流动控制方程中。添加在 Eulerian 网格节点上的外力项 $\mathbf{F}_b(\mathbf{r}, t)$ 、热源项 $Q_b(\mathbf{r}, t)$ 和质量源项 $J_b(\mathbf{r}, t)$ 可由式(42)~式(44)计算。

$$\mathbf{F}_b(\mathbf{r}, t) = \sum_j f_{bj} D_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{X}_b) \Delta s \quad (42)$$

$$Q_b(\mathbf{r}, t) = \sum_j \delta q_{bj} D_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{X}_b) \Delta s \quad (43)$$

● Lagrangian 网格

○ Eulerian 网格

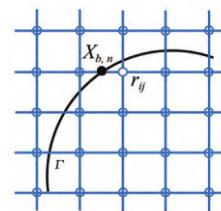


图 2 IBM 处理颗粒边界结点示意图

$$J_b(r,t) = \sum_j \delta J_b(r - X_b) \Delta s \quad (44)$$

式中, Δs 为 Lagrangian 点对应的弧线长度; f_b 、 δq_b 和 δJ_b 分别为作用于 Lagrangian 点 X_b 上的力密度、热通量和质量通量, 其影响通过离散的 Dirichlet 函数 $D_{ij}(\mathbf{x})$ 扩散回流体节点。本工作中, $D_{ij}(\mathbf{x})$ 近似为式(45)、式(46)。

$$D_{ij}(r_i - X_b) = \delta(x_{ij} - x_b) \delta(y_{ij} - y_b) \quad (45)$$

$$\delta(\Delta r) = \begin{cases} \frac{1}{8}(3 - 2|\Delta r| + \sqrt{1 + 4|\Delta r| - 4\Delta r^2}) & 0 < |\Delta r| < 1 \\ \frac{1}{8}(5 - 2|\Delta r| - \sqrt{7 + 12|\Delta r| - 4\Delta r^2}) & 1 \leq |\Delta r| < 2 \\ 0 & |\Delta r| \geq 2 \end{cases} \quad (46)$$

式中, x_b 、 y_b 为 Lagrangian 点 X_b 的坐标; x_{ij} 、 y_{ij} 是 Eulerian 节点 r_{ij} 的坐标。

为满足无滑移边界, 作用于 Lagrangian 点 X_b 上的 f_b 可由式(47)、式(48)求解。

$$f_b = 2\rho_f \frac{U_b - u^{noF}(X_b, t)}{\delta t} \quad (47)$$

$$u^{noF}(X_b, t) = \sum_j u^{noF}(r, t) D_{ij}(r - X_b) \delta_x^2 \quad (48)$$

式中, u^{noF} 为不施加外源项时流体的宏观速度, 通过 Dirichlet 函数从 Eulerian 节点插值到 Lagrangian 节点上获得; U_b 为颗粒表面 X_b 点的预期速度, 用式(49)计算, 其中 $X_b - X_p$ 为颗粒中心点 X_p 指向 X_b 的向量。

$$U_b = U_p + \omega_p(X_b - X_p) \quad (49)$$

对于温度场和浓度场, 由于在边界处存在反应过程, 在求解 δq_b 与 δJ_b 时需考虑通量的影响。对于温度场, 作用于 Lagrangian 点 X_b 上的法向温度梯度 $\frac{\partial T^{noE}}{\partial n}(X_b, t)$ 依赖于法向量 n , 由式(50)~式(52) 计算^[27]。

$$\frac{\partial T^{noE}}{\partial x}(X_b, t) = \sum_j \frac{\partial T^{noE}}{\partial x}(r, t) D_{ij}(r - X_b) \delta_x^2 \quad (50)$$

$$\frac{\partial T^{noE}}{\partial y}(X_b, t) = \sum_j \frac{\partial T^{noE}}{\partial y}(r, t) D_{ij}(r - X_b) \delta_x^2 \quad (51)$$

$$\frac{\partial T^{noE}}{\partial n}(X_b, t) = \frac{\partial T^{noE}}{\partial x}(X_b, t) \cdot n_x + \frac{\partial T^{noE}}{\partial y}(X_b, t) \cdot n_y \quad (52)$$

式中, $\frac{\partial T^{noE}}{\partial x}(r, t)$ 和 $\frac{\partial T^{noE}}{\partial y}(r, t)$ 表示在 Eulerian 节点 r_{ij} 处不施加外源项时流体的宏观温度 T^{noE} 关于 x 和 y 的导数, 由二阶中心差分格式得到; n_x 和 n_y 分别为单位法向量在 Lagrangian 点 X_b 上 x 和 y 方向的分量; 热通量 δq_b 为式(53)。

$$\delta q_b = 2\rho_f \left[\frac{Q_{re}}{\rho_i c_p} + \alpha \frac{\partial T^{noE}}{\partial n}(X_b, t) \right] \quad (53)$$

对于浓度场, 作用于 Lagrangian 点 X_b 上的质量通量 δJ_b 为式(54)。

$$\delta J_b = 2 \left[k_r C_{A, t} + D \frac{\partial C_i^{noE}}{\partial n}(X_b, t) \right] \quad (54)$$

$$\frac{\partial C_i^{noE}}{\partial n}(X_b, t) = \frac{\partial C_i^{noE}}{\partial x}(X_b, t) \cdot n_x + \frac{\partial C_i^{noE}}{\partial y}(X_b, t) \cdot n_y \quad (55)$$

式中, $\frac{\partial C_i^{noE}}{\partial n}$ 为不施加外源项时流体的法向浓度梯度。

2 模型验证

为验证数值模型程序的正确性, 采用浸入边界-格子 Boltzmann 方法求解了三个基准算例, 通过对模拟结果与文献数据, 分别对反应扩散模型和传热模型进行了验证。

2.1 矩形区域内的反应扩散

首先, 通过模拟矩形通道内的反应扩散问题, 并通过对比解析解, 对流动和反应扩散过程进行验证^[28]。在计算域网格尺寸为 $L \times H = 100 \times 80$ 的矩形通道中, 通道入口处 ($x=0$) 浓度为常数, 出口 ($x=L$) 和下壁面 ($y=0$) 为零通量边界。通道上壁面 ($y=H$) 发生如式(56)所示非均相化学反应。

$$-D \frac{\partial C}{\partial y}|_{y=H} = k(C|_{y=H} - C_{eq}) \quad (56)$$

当系统达到稳态时, 反应扩散问题的解析解可表示为式(57)。

$$C(x, y) = (C_0 - C_{eq}) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(\beta_n H)}{N_n^2 \beta_n} \times \frac{\cosh[\beta_n(x - L)]}{\cosh[\beta_n L]} \cos(\beta_n y) + C_{eq} \quad (57)$$

$$N_n^2 = \frac{H}{2} \left[1 + \frac{\sin(2\beta_n H)}{2\beta_n H} \right] \quad (58)$$

$$(\beta_n H) \tan(\beta_n H) = \frac{kH}{D} \quad (59)$$

图 3 为 Da 为 48 时 ($Da=kH/D$) 计算域内反应物浓度等值线图, 模拟结果与解析解基本一致, 误差为 3.36%, 证明了程序的可靠性。

2.2 矩形通道内的反应颗粒绕流

Molins 等^[29]采用多种数值模拟方法对矩形通道内含有反应颗粒的绕流问题进行了模拟, 可作为验证浸入边界法处理曲面边界问题准确性的基准算例。在计算域 $L \times H = 256 \times 128$ 的矩形通道内中心处放置一个直径为 $0.4H$ 的圆柱, 通道左侧为流动入口, 颗粒 $Re=0.6$ 。流体流动在颗粒表面和通道上下

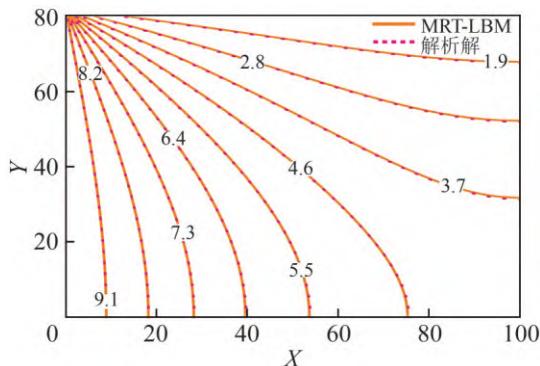


图3 矩形通道内反应物浓度等值线图

壁面处满足无滑移边界条件, 通道右侧出口为压力边界。此外, 入口处恒定反应物A浓度 $C_{0,A}=0.01$, 出口处为充分发展边界。颗粒表面发生一级化学反应, 如式(13)所示, 模拟参数与 Molins 等^[29]一致。当系统达到稳态时, 模拟结果如图4所示。图4(a)和(b)分别为通道中心沿水平线和垂直线上反应物A的浓度分布对数曲线。由结果可以看出, 模拟结果与文献数据吻合较好, 证明了本数值方法对于复杂曲面边界的准确性。

2.3 热颗粒沉降 DKT 过程

在等温条件下模拟双颗粒沉降 DKT 过程, 已成为验证运动颗粒运动边界的基准算例。而对于耦

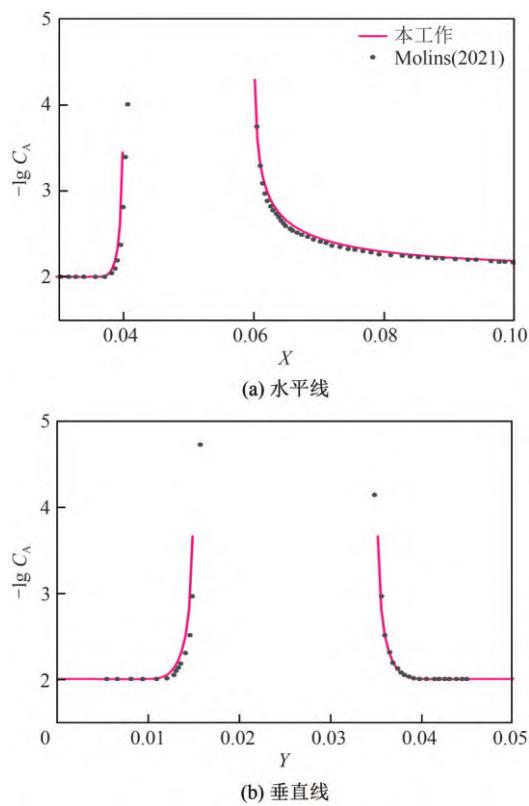
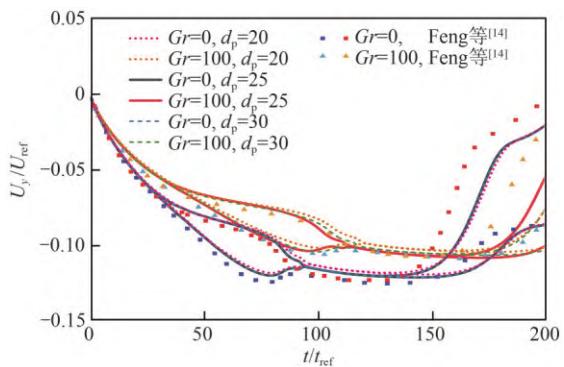


图4 反应颗粒绕流反应物浓度分布

合传热的双颗粒沉降问题, 本工作参照 Feng 和 Michaelides^[14]的报道, 采用浸入边界法处理颗粒边界, 对充满冷流体的通道中两个自由沉降的热颗粒进行数值模拟。在尺寸为 $L \times H = 2\text{cm} \times 6\text{cm}$ 的计算域中, 放置两个直径为 0.2cm 、密度为 1.25g/cm^3 的圆形颗粒, 初始释放位置分别为 $(1\text{cm}, 5.2\text{cm})$ 和 $(1.001\text{cm}, 4.8\text{cm})$ 。流场中流体密度为 $\rho_f=1.01$, $Pr=1$, 分别讨论 $Gr=0$ 和 $Gr=100$ 的情况。分别采用20、25、30个网格描述颗粒直径, 对网格无关性进行验证。图5为双颗粒沉降过程中量纲为1的垂直沉降速度随时间的变化情况, 可以看出模拟结果与文献数据较为吻合, 且 $d_p=25$ 与 $d_p=30$ 的颗粒运动轨迹基本一致。因此, 为节省计算成本, 本工作后续讨论中每个颗粒采用25个网格解析。

图5 两颗粒在 $Gr=0$ 和 $Gr=100$ 、量纲为1时的垂直沉降速度随时间的变化情况

3 结果与讨论

对充满热流体的通道内发生吸热反应的双颗粒沉降过程进行了模拟, 颗粒为冷态释放并保持颗粒表面温度 $T_h=1$ 。将直径 $d_p=0.2\text{cm}$ 的两颗粒, 分别从初始位置 $(0.5L, 0.9H)$ 和 $(0.5L, 0.9H - 2d_p)$ 处释放, 通过改变颗粒 Re 、 Gr 和 Da , 探究反应颗粒运动行为的影响因素。颗粒 Re 、 Gr 和 Da 的取值分别为: $Re=3\sim75$, $Gr=0\sim500$, $Da=0\sim6000$ 。当 $Da=0$, 即不发生化学反应时, 颗粒表面温度恒定为 $T=0$, 组分 i 的浓度恒定, 即 $C_i=0$ 。

已有许多研究表明, 颗粒 Re 影响颗粒沉降运动行为, 以及决定 DKT 现象是否发生。固定 Da 数, 讨论不同 Re 下 Gr 对颗粒运动行为的影响, 发现根据颗粒 Re 的大小, 颗粒沉降运动行为可以分为3个阶段。具体可以划分为 $Re<5$ 、 $5<Re<40$ 和 $40<Re<75$ 。为进一步理解这三个阶段背后的机

制，下面将进行详细的分析和讨论。

3.1 高 Re 数时反应颗粒沉降行为

本小节以 $Re=75$ 为例，讨论了颗粒 Re 较高时 ($40 < Re < 75$) 两个反应颗粒的沉降行为，还分别讨论了不同 Gr 和 Da 的影响。为了说明颗粒表面反应的发生对于沉降行为的影响，分别模拟了 $Da=0$ 和 $Da=6000$ ，即不发生化学反应和发生快速反应的情况（固定 $Gr=250$ ）。图 6 为颗粒沉降过程中，不同反应速率下流场的浓度和温度分布云图。通过对比两组反应条件下的浓度场和温度场信息可以看出，相对于温度场，化学反应对颗粒周围浓度场的影响相对较小。因此在本工作中重点讨论热浮力对于颗

粒运动的影响，对颗粒与流体之间传质过程的影响可以忽略不计。

热流场中的冷颗粒在热对流的影响下，两颗粒所受热浮力与重力方向一致。当 $Da=3000$ 、 $Re=75$ 时，分别选取 $Gr=0$ 、100、250、500，讨论热对流对流体流动和颗粒运动行为的影响。 Gr 对颗粒的垂直位置、颗粒间距及曳力系数的影响如图 7 所示，图 7(a) 和(c) 中虚线代表的颗粒 1 为下方引导颗粒，实线代表的颗粒 2 为上方跟踪颗粒。随着 Gr 的增大，两颗粒沉降速度逐渐增大，当跟踪颗粒进入引导颗粒的尾流区时，跟踪颗粒在冷而密的尾流中，其周围流场产生向下的热对流，两颗粒加速靠

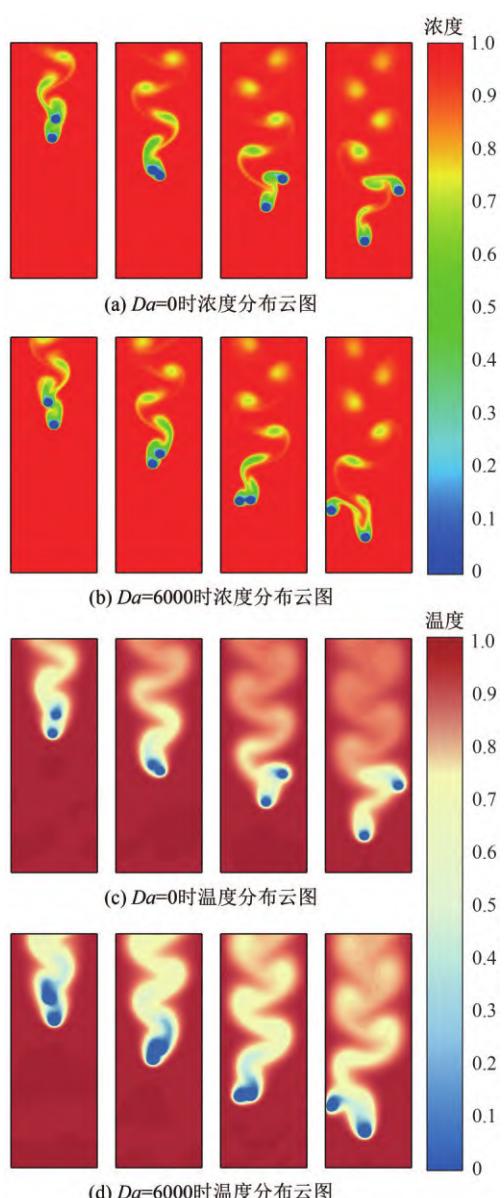


图 6 两颗粒在 $Re=75$ 、 $Gr=250$ 时的浓度和温度分布云图（量纲为 1）

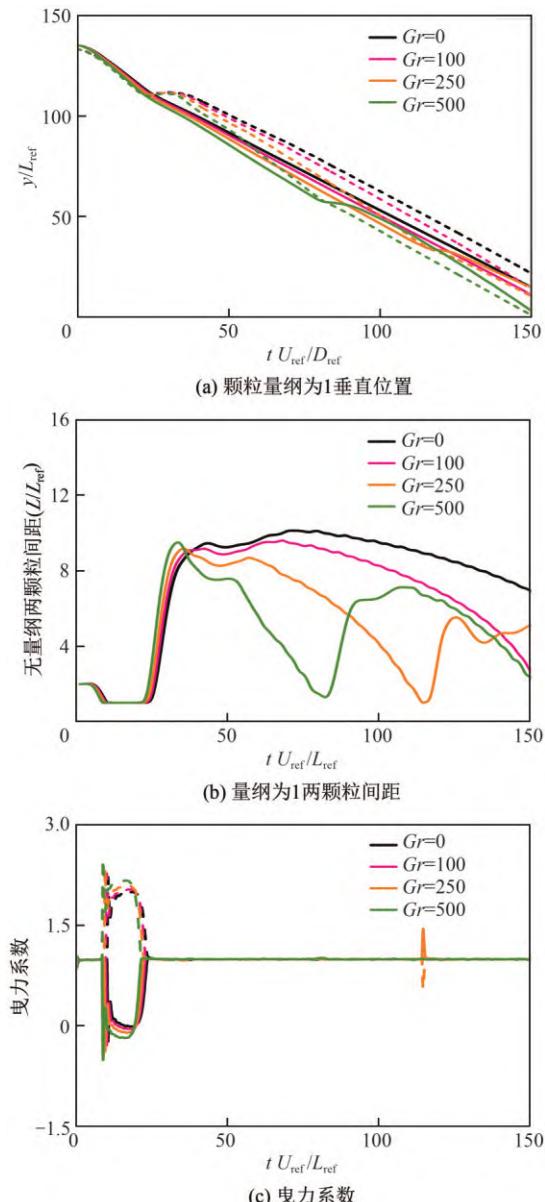


图 7 $Re=75$ 、 $Da=3000$ 时 Gr 对颗粒的量纲为 1 垂直位置、颗粒间距及曳力系数的影响

近。随着两颗粒间距离逐渐减小，颗粒间排斥过程增强、斥力增加，且接触、翻滚过程变短，热对流倾向于将颗粒推开。随着颗粒逐渐远离，颗粒-颗粒间相互作用逐渐减弱，跟踪颗粒在重力与热浮力的影响下再次进入牵引区并出现 DKT 现象，DKT 进程大幅加快。因此，对于 Re 较大的颗粒，颗粒惯性作用占主导， Gr 的增加缩短了 DKT 过程的发展周期，两颗粒沉降时更趋向于聚集。如图 7(b) 所示，相比于等温颗粒，当 $0 < Gr \leq 250$ 时，两颗粒在翻滚分离后快速靠近，并经历第二次 DKT 过程。而当 Gr 增加至 500 时，热浮力效应增强，强化了颗粒表面的热对流。随着跟踪颗粒的加速靠近，热对流冲击引导颗粒的后方并使其向一侧偏移，阻止了两颗粒发生碰撞，使得跟踪颗粒从一定距离外绕过。如图 7(c) 所示，当 $Gr=500$ 时，热对流的影响占主导，两颗粒仅出现一次 DKT 现象。

选取 $Re=75$ 、 $Gr=250$ ，分别对 $Da=0$ 、300、3000、6000 时的沉降过程进行模拟，讨论反应速率对流体流动和颗粒运动行为的影响。 Da 对颗粒的垂直位置、颗粒间距及曳力系数的影响如图 8 所示。由于颗粒表面发生吸热反应，颗粒可看作是冷源，反应吸热产生的热浮力方向与重力方向一致。由图 7 可以看出，在较低的 Gr 下，反应速率的快慢主要影响 DKT 过程的发展周期，对颗粒沉降速度的影响相对较小。随着 Da 增加，颗粒周围流场温度不断降低，热浮力的影响逐渐增强，DKT 进程加快。可见，对于中低 Gr ， Da 对颗粒运动行为的影响与 Gr 的影响保持一致。此外，随着反应的进行，反应热的影响逐渐增加，颗粒沉降行为的差异逐渐增大。

3.2 中等 Re 数下反应颗粒沉降行为

本小节以 $Re=35$ 为例，讨论了颗粒为中等 Re 时 ($5 < Re < 35$) 两个反应颗粒的沉降行为，还分别讨论了不同 Gr 和 Da 的影响。固定 $Da=3000$ ，探究 Gr 对颗粒运动行为的影响。图 9 为 $Gr=0$ 、100、250、500 时颗粒量纲为 1 的垂直位置、水平位置及颗粒间距。相比于高 Re 的颗粒，随着 Re 减小，颗粒惯性减弱，颗粒间相互作用更容易受热浮力的影响，因此 Gr 对中等 Re 颗粒的运动行为影响更显著。随着 Gr 的增大，在垂直方向上，颗粒沉降时速度显著增加，DKT 过程提前发生。而水平方向上，颗粒受热浮力的影响出现尾涡脱落现象，颗粒-壁面间、颗粒-颗粒间斥力增大。同时，在颗粒碰撞、翻滚后，两颗粒以相同的频率作横向振荡，且

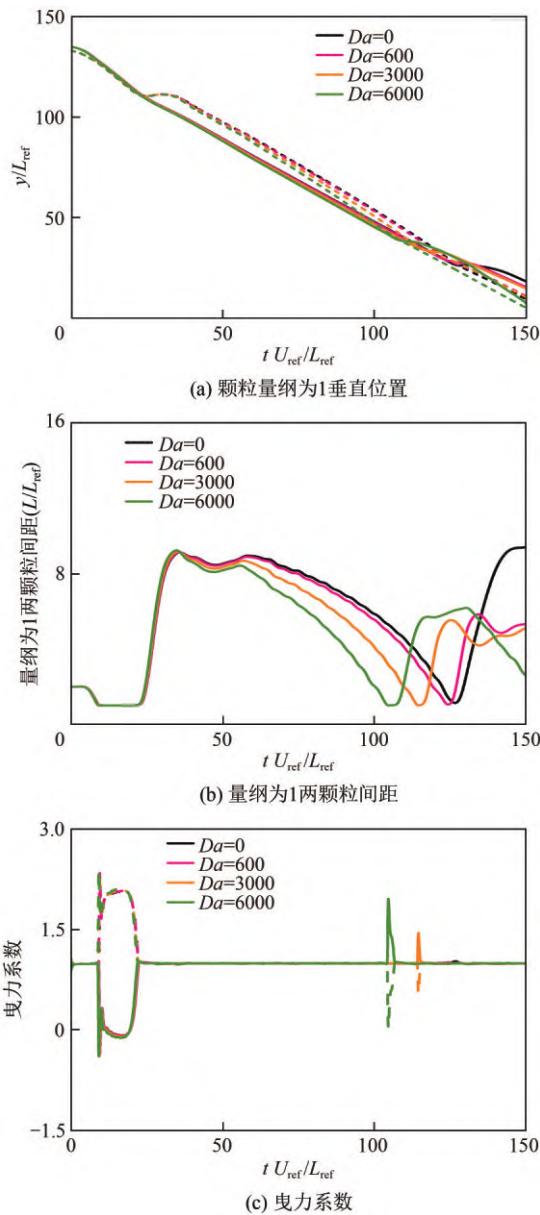
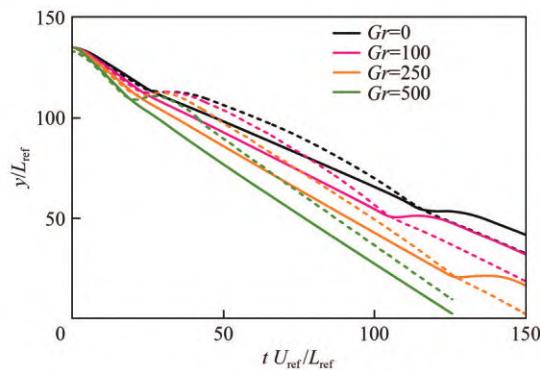


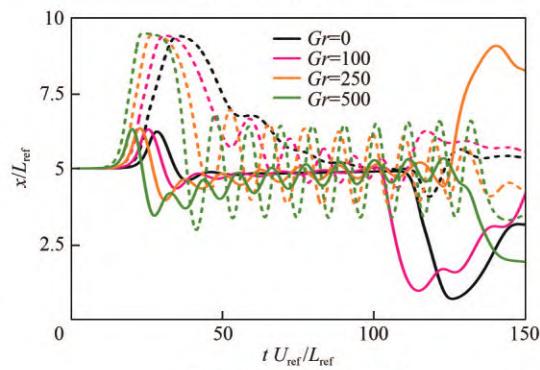
图 8 $Re=75$ 、 $Gr=250$ 时 Da 对颗粒的量纲为 1 垂直位置、颗粒间距及曳力系数的影响

引导颗粒的幅值更小、相位略微领先。如图 9(b) 所示，此时实线表示的颗粒 2 位于下方，为引导颗粒。这是由于跟踪颗粒同时受到自身和下方引导颗粒尾流的作用力，从而产生了共振。值得注意的是，这一现象同样发生在高 Re 颗粒中，但振荡的幅值要小得多。此外，对于 $Gr>0$ 的两颗粒，在发生 DKT 过程后在斥力的作用下相互远离，随后不再接触碰撞。此时热对流的影响占主导，两颗粒沉降时更趋向于分离。

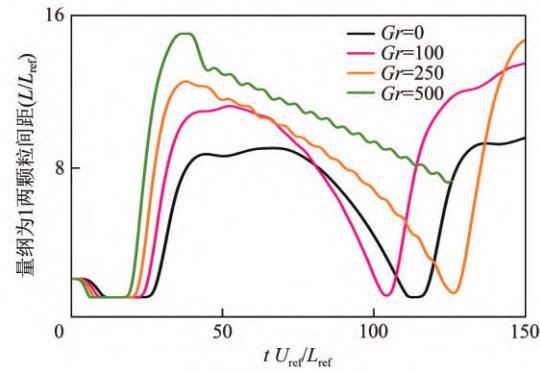
当 $Re=35$ 、 $Gr=250$ 时，分别对 $Da=0$ 、300、3000、6000 时的沉降过程进行模拟， Da 对颗粒的垂直位



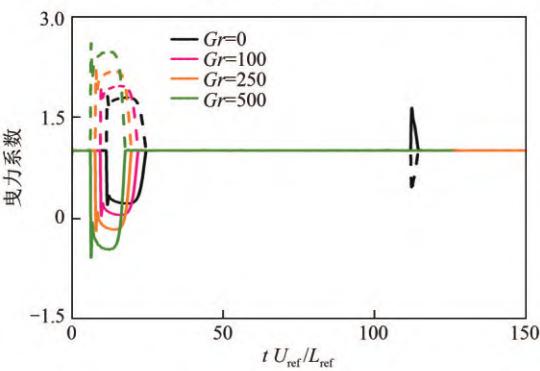
(a) 颗粒量纲为1垂直位置



(b) 颗粒量纲为1水平位置



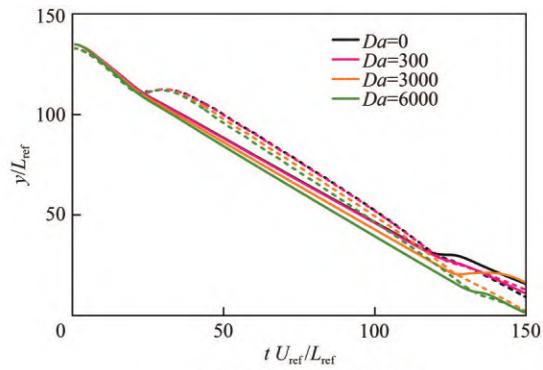
(c) 量纲为1两颗粒间距



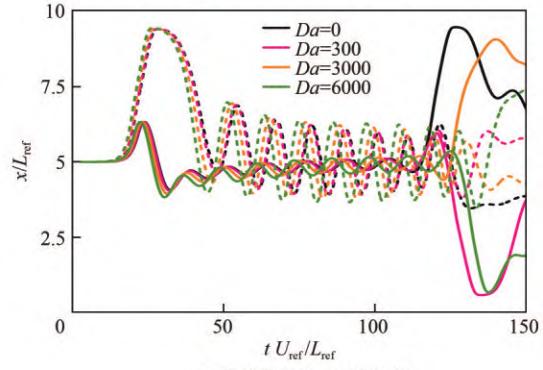
(d) 曳力系数

图9 $Re=35$ 、 $Da=3000$ 时不同 Gr 对颗粒的量纲为1垂直位置、水平位置、颗粒间距及曳力系数的影响

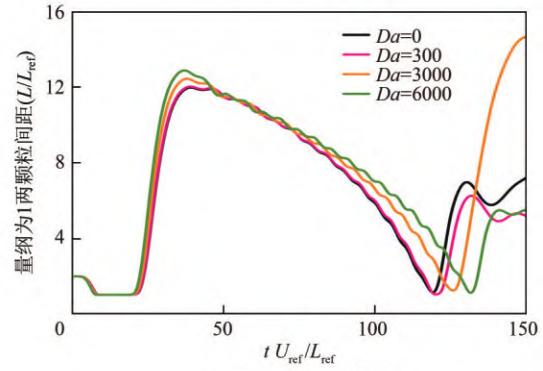
置、颗粒间距及曳力系数的影响如图10所示。可以看出， Da 对颗粒运动行为的影响与 Gr 保持一致。



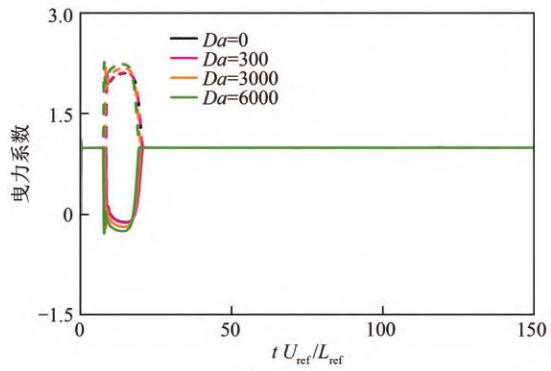
(a) 颗粒量纲为1垂直位置



(b) 颗粒量纲为1水平位置



(c) 量纲为1两颗粒间距



(d) 曳力系数

图10 $Re=35$ 、 $Gr=250$ 时不同 Da 对颗粒的量纲为1垂直位置、水平位置、颗粒间距及曳力系数的影响

随着 Da 增加，反应产生的热对流的影响不断加强，颗粒间相互作用力逐渐增加，两颗粒在沉降时仅经

历一次 DKT 过程，随后更趋向于分离。

3.3 低 Re 数下反应颗粒沉降行为

本小节以 $Re=3$ 为例，讨论了颗粒为低 Re 下 ($Re<5$) 两个反应颗粒的沉降行为。对于等温颗粒，当 Re 相对较低时，沉降过程中不发生 DKT 现象。当选取不同的 Gr 并固定 $Da=0$ ，即颗粒表面不发生化学反应时，两颗粒的垂直位置和颗粒间距如图 11 所示。随着 Gr 的增加，颗粒在热浮力的影响下，经历一次 DKT 过程。图 12 所示为分别取 $Gr=0$ 和 $Gr=250$ 时流场中的涡量云图和速度矢量图。由

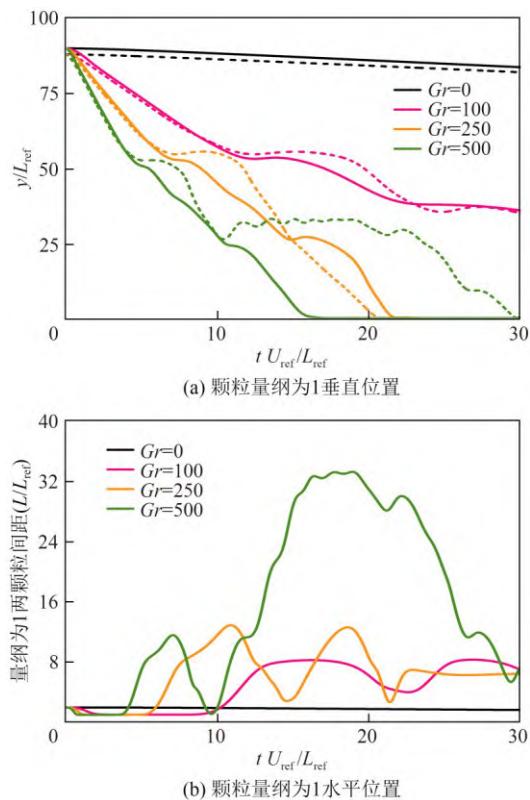


图 11 $Re=3$ 、 $Da=0$ 时两颗粒量纲为 1 位置和颗粒间距

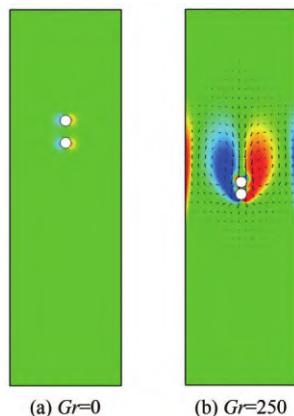


图 12 $Gr=0$ 和 $Gr=250$ 时流场中的涡量云图和速度矢量图
($Da=0$, $t U_{ref}/D_{ref}=1.6$)

图 12(b)可以看出，由于冷颗粒在热流体中受到与重力方向一致的热浮力，颗粒沉降速度增大，跟踪颗粒在尾流的推动下进入引导颗粒的尾部低压区，从而出现 DKT 现象。在颗粒经过碰撞、翻滚后，两颗粒在热对流的影响下相互远离，处于排斥状态，不再出现 DKT 现象。此外，当 Gr 增大至 500 时，此时颗粒的沉降速度远大于等温颗粒，两颗粒在壁面的限制下被迫发生碰撞，颗粒间距显著增加，如图 13(a)所示。而反应的发生则削弱了这一过程，当 $Gr=500$ 、 $Da=6000$ ，即颗粒表面发生快速反应时，颗粒不会在壁面的限制下发生碰撞。此时，流场中温度分布和速度矢量如图 13(b)所示，两颗粒的垂直位置和颗粒间距如图 14 所示。随着反应的进行，颗粒周围流场温度持续降低，两颗粒间热对流的影响增强、斥力增加，促使跟踪颗粒从一定距离外绕过引导颗粒，阻止了碰撞过程的发

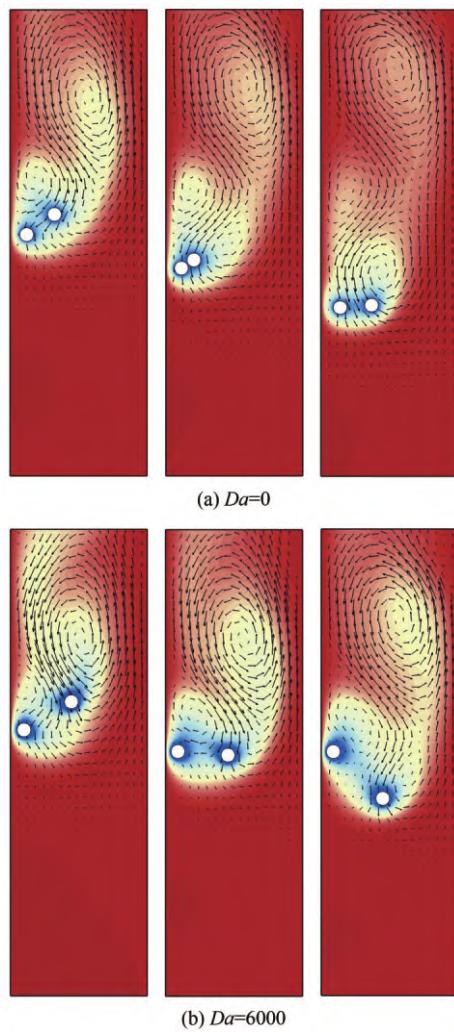
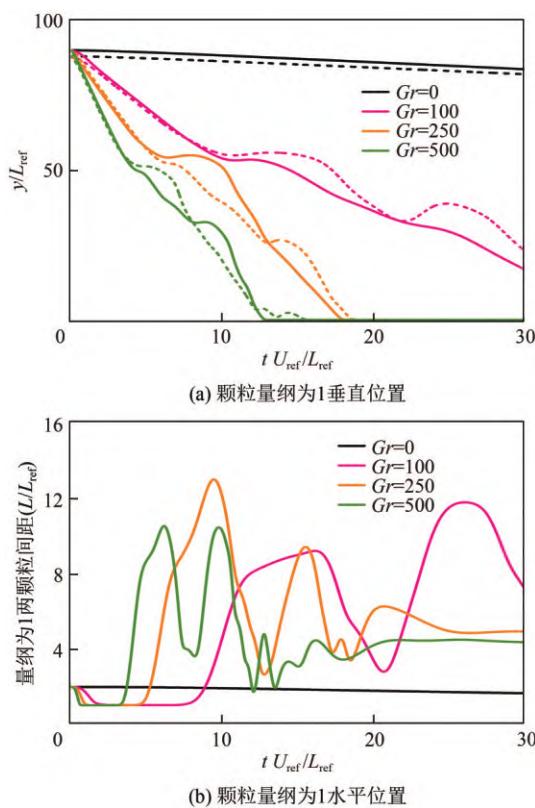


图 13 $Da=0$ 和 $Da=6000$ 时流场中温度分布和速度矢量图
($Gr=500$)

图 14 两颗粒在 $Re=3$ 、 $Da=6000$ 时的颗粒量纲为 1 位置

生, 颗粒始终处于过渡状态。

4 结论

采用浸入边界-格子 Boltzmann 方法对耦合化学反应的催化剂双颗粒在窄通道的沉降过程进行了直接数值模拟, 研究吸热反应对颗粒-流体间相互作用和颗粒运动行为的影响。结果表明, 反应颗粒的沉降运动受颗粒 Re 、 Gr 和 Da 的协同影响。由于热流体中发生吸热反应的冷颗粒所受热浮力与重力方向一致, 随着 Gr 的增加, 颗粒沉降速度增加, 颗粒在热对流的作用下相互远离。对于中高 Gr 的颗粒, 在经历碰撞、翻滚后, 两颗粒以相同的频率作横向振荡, 且引导颗粒的幅值更小、相位略微领先。根据颗粒 Re 的大小, 颗粒运动模式可以分为三个阶段, 随着 Re 的增大, 热对流的影响逐渐减弱, 颗粒惯性作用占主导。对于高 Re 的颗粒, 在中低 Gr 条件下, 双颗粒 DKT 过程的发展周期缩短, 两颗粒更趋向于聚集。对于低 Re 的颗粒, 颗粒惯性作用较弱, 颗粒在热对流的影响下, 出现 DKT 现象。而 Da 主要影响颗粒周围的热对流, 当 Da 较大, 即颗粒表面发生快速反应时, 颗粒周围流体温度梯度增大, 颗粒-颗粒间相互作用增强, 避免了

颗粒间碰撞行为, 两颗粒始终处于过渡状态。

符号说明

C	溶质浓度, mol/L^3
c	格子速度
c_p	比热容
c_s	格子声速, m/s
D	溶质扩散系数, m^2/s
Da	达姆科勒数
e_i	格子离散速度, m/s
F	体积力, N/m^3
F_B	热浮力, N/m^3
f	流体粒子分布函数
Gr	格拉晓夫数
g	重力加速度, m/s^2
g	浓度分布函数
ΔH	反应生成焓, kJ/kg
h	温度分布函数
J	反应源项
j	权重系数
k	反应速率常数
M	正交变换矩阵
Pr	普朗特数
Q	热源项
Re	雷诺数
S	对角弛豫矩阵
Sc	施密特数
T	温度, K
t	时间, s
u	宏观速度, m/s
α	热扩散系数, m^2/s
β	热膨胀系数, K^{-1}
ρ	密度, kg/m^3
μ	动力黏度, $\text{Pa} \cdot \text{s}$
ν	运动黏度, m^2/s
ω	权重系数
上角标	
eq	平衡分布函数
下角标	
f	流体相
i	粒子运动方向, $i = 1, \dots, 9$
p	颗粒
r	反应物
ref	参考值
s	固相

参考文献

- [1] LIN Shanfan, ZHI Yuchun, LIU Zhiqiang, et al. Multiscale dynamical cross-talk in zeolite-catalyzed methanol and dimethyl ether conversions [J]. National Science Review, 2022, 9(9): nwac151.
- [2] TIAN Peng, WEI Yingxu, YE Mao, et al. Methanol to olefins (MTO): From fundamentals to commercialization[J]. ACS Catalysis, 2015, 5(3): 1922–1938.
- [3] VOGT Eelco, WECKHUYSEN Bert M. Fluid catalytic cracking: recent developments on the grand old lady of zeolite catalysis[J]. Chemical Society Reviews, 2015, 44(20): 7342–7370.
- [4] CHEN Meng, CHEN Zhao, TANG Yaping, et al. CFD-DEM simulation of particle coating process coupled with chemical reaction flow model [J]. International Journal of Chemical Reactor Engineering, 2021, 19 (4): 393–413.
- [5] ZHU Litao, PAN Hui, SU Yuanhai, et al. Effect of particle polydispersity on flow and reaction behaviors of methanol-to-olefins fluidized bed reactors[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2017, 56(4): 1090–1102.
- [6] ZHANG Jingyuan, LU Bona, CHEN Feiguo, et al. Simulation of a large methanol-to-olefins fluidized bed reactor with consideration of coke distribution[J]. Chemical Engineering Science, 2018, 189: 212–220.
- [7] HU Dongfang, HAN Guodong, LUNGU Musango, et al. Experimental investigation of bubble and particle motion behaviors in a gas-solid fluidized bed with side wall liquid spray[J]. Advanced Powder Technology, 2017, 28(9): 2306–2316.
- [8] JOSEPH Daniel D, FORTES Antonio F, LUNDGREN T P, et al. Nonlinear mechanics of fluidization of spheres, cylinders, and disks in water[J]. Physics of Fluids, 1987, 30(9): 2599–2599.
- [9] FENG James J, HU Howard H, JOSEPH Daniel D. Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid Part 1. Sedimentation[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1994, 261: 95–134.
- [10] AIDUN Cyrus K, DING E Jiang. Dynamics of particle sedimentation in a vertical channel: Period-doubling bifurcation and chaotic state[J]. Physics of Fluids, 2003, 15(6): 1612–1621.
- [11] NIE Deming, LIN Jianzhong, GAO Qi. Settling behavior of two particles with different densities in a vertical channel[J]. Computers & Fluids, 2017, 156: 353–367.
- [12] GHOSH Sudeshna, KUMAR Manish. Study of drafting, kissing and tumbling process of two particles with different sizes and densities using immersed boundary method in a confined medium[J]. Applied Mathematics and Computation, 2020, 386: 125411.
- [13] GAN Hui, CHANG Jianzhong, FENG James J, et al. Direct numerical simulation of the sedimentation of solid particles with thermal convection [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2003, 481: 385–411.
- [14] FENG Zhigang, MICHAELIDES Efstrathios E. Inclusion of heat transfer computations for particle laden flows[J]. Physics of Fluids, 2008, 20(4): 040604.
- [15] ESHGHINEJADFARD A, THÉVENIN D. Numerical simulation of heat transfer in particulate flows using a thermal immersed boundary lattice Boltzmann method[J]. International Journal of Heat and Fluid Flow, 2016, 60: 31–46.
- [16] YANG Bo, CHEN Sheng, CAO Chuansheng, et al. Lattice Boltzmann simulation of two cold particles settling in Newtonian fluid with thermal convection[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2016, 93: 477–490.
- [17] LIU Ming, SHEN Zhongjie, LIANG Qinfeng, et al. Particle fluctuating motions induced by gas-solid phase reaction[J]. Chemical Engineering Journal, 2020, 388: 124348.
- [18] ZHANG Hancong, LUO Kun, HAUGEN Nils Erland L, et al. Drag force for a burning particle[J]. Combustion and Flame, 2020, 217: 188–199.
- [19] OU Zhisong, GUO Liejin, CHI Cheng, et al. Interface-resolved direct numerical simulations of interphase momentum, heat, and mass transfer in supercritical water gasification of coal[J]. Physics of Fluids, 2022, 34 (10): 103319.
- [20] ZHAO Zelin, XU Zhiguo. Direct simulation on particle sedimentation mechanisms in corrosive liquids[J]. Powder Technology, 2022, 404: 117503.
- [21] LI Like, MEI Renwei, KLAUSNER James F. Boundary conditions for thermal lattice Boltzmann equation method[J]. Journal of Computational Physics, 2013, 237: 366–395.
- [22] LI Like, MEI Renwei, KLAUSNER James F. Lattice Boltzmann models for the convection-diffusion equation: D2Q5 vs D2Q9[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2017, 108: 41–62.
- [23] HUANG Rongzong, WU Huiying. A modified multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for convection-diffusion equation[J]. Journal of Computational Physics, 2014, 274: 50–63.
- [24] GLOWINSKI R, PAN T W, HESLA T I, et al. A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies: Application to particulate flow[J]. Journal of Computational Physics, 2001, 169(2): 363–426.
- [25] FENG Zhigang, MICHAELIDES Efstrathios E. The immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid-particles interaction problems [J]. Journal of Computational Physics, 2004, 195(2): 602–628.
- [26] RAHMAN NEZHAD Javad, Ali MIRBOZORGI Seyed. An immersed boundary-lattice Boltzmann method to simulate chaotic micromixers with baffles[J]. Computers & Fluids, 2018, 167: 206–214.
- [27] REN Weiwei, SHU Chang, YANG Wenming. An efficient immersed boundary method for thermal flow problems with heat flux boundary conditions[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2013, 64: 694–705.
- [28] KANG Qinjun, LICHTNER Peter C, ZHANG Dongxiao. Lattice Boltzmann pore-scale model for multicomponent reactive transport in porous media[J]. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 2006, 111(B5): B05203.
- [29] MOLINS Sergi, SOULAIN Cyprien, PRASIANAKIS Nikolaos I, et al. Simulation of mineral dissolution at the pore scale with evolving fluid-solid interfaces: Review of approaches and benchmark problem set[J]. Computational Geosciences, 2021, 25(4): 1285–1318.