



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

研究生学位论文答辩申请书

申请人：_____赵鹏_____

论文题目：气固流态化离散模拟：CFD-DEM-IBM 方法

指导教师：_____王军武_____

协助指导：_____徐骥_____

学位类别：_____工学博士_____

学科（专业）：_____化学工程_____

研究方向：_____多相流数值模拟_____

研究所：_____过程工程研究所_____

申请日期：_____2022 年 05 月 10 日_____

中国科学院大学制

填 表 说 明

1. 本表内容须真实、完整、准确，表中有关统计情况要与所填内容一致。
2. “学位类别”名称填写：学术型学位填写哲学博士、教育学博士、理学博士、工学博士、农学博士、医学博士、管理学博士，哲学硕士、经济学硕士、法学硕士、教育学硕士、文学硕士、理学硕士、工学硕士、农学硕士、医学硕士、管理学硕士等；专业学位填写工程博士、工程硕士、工商管理硕士(MBA)、金融硕士、应用统计硕士、翻译硕士、应用心理硕士、农业推广硕士、工程管理硕士、公共管理硕士、药学硕士等。
3. “学科(专业)”名称填写：学术型学位填写“二级学科”全称；专业学位填写“培养领域”全称。
4. 表中发表论文、专著、获得的科研成果奖励、专利情况：应填写在学期间所发表和获得的情况。
5. “作者、获奖者、获专利者列表”栏和发表论文“作者列表”栏：作者、获奖者、获专利者排名在前5名的情况下填写此栏。
6. “发表论文”应是反映学位论文工作成果的文章，包括“已发表论文”、“已正式接收论文”，“未正式接收的论文”不填入表内。
7. 发表论文“刊物类型”选择其一：包括“国内刊物”、“国际刊物”、“国内会议”、“国际会议”。
8. 发表论文“收录情况”选择其一：包括“SCI收录”、“EI收录”、“ISTP收录”、“SSCI收录”、“CSCD收录”、“核心刊物”。
9. “学位课程”：包括“公共学位课”、“专业学位课”，如为补考成绩，请在学位课程名称后用*号注明。
10. “非学位课程”：包括“公共选修课”、“专业选修课”，如为补考成绩，请在非学位课程名称后用*号注明。
11. “论文关键词”：填写3-5个关键词，每词用“，”隔开。

姓名	赵鹏	性别	男	照片 (一寸免冠)
出生日期	1994 年 06 月 16 日	民族	汉	
身份证号	61032819940616031X	政治面貌	中共党员	
国别与地区 (限外国留学生、港澳台学生填写)				
入学日期	2016 年 09 月	学习年限	6 年	
主要 简 历	起止年月 (自大学填起)	学习或工作单位	职务、职称	获学位情况
	2012.09-2016.07	中国矿业大学(北京)	学生	学士
	2016.09-2022.07	中国科学院大学	学生	
在学 期 间 受 过 何 种 奖 励 或 处 分	<p>在学期间获奖情况： 中国科学院大学三好学生(2019) 过程工程研究所优秀共产党员(2019) 中国科学院大学优秀学生干部(2020) 中国颗粒学会第十一届学术年会优秀报告奖(2020) 第二届全国过程模拟与仿真学术会议优秀学生报告奖(2020) 过程工程研究所所长特别奖学金(2021)</p> <p style="text-align: right;">申请人(签字): 赵鹏</p> <p style="text-align: right;">2022 年 5 月 10 日</p>			

注：同等学力人员“入学日期”填写“资格审查通过日期”。在职专业学位人员“入学日期”填写“正式录取日期”。

在 学 期 间 发 表 论 文 情 况

论 文 题 目	刊物名称	刊物类型	卷/期号	发表时间	排名	作者列表	收录情况
A CFD-DEM-IBM method for Cartesian grid simulation of gas-solid flow in complex geometries	Chemical Engineering Journal	国际刊物	389	2020 年 06 月	第一	Peng Zhao; Ji Xu; Wei Ge; Junwu Wang	SCI 收录
A computational fluid dynamics-discrete element-immersed boundary method for Cartesian grid simulation of heat transfer in compressible gas-solid flow with complex geometries	Physics of Fluids	国际刊物	32	2020 年 07 月	第一	Peng Zhao; Ji Xu; Xingchi Liu; Wei Ge; Junwu Wang	SCI 收录
Euler-Lagrange simulation of dense gas-solid flow with local grid refinement	Powder Technology	国际刊物	399	2022 年 02 月	第一	Peng Zhao; Ji Xu; Wei Ge; Junwu Wang	SCI 收录
Testing CFD-DEM method with a stochastic drag formulation using particle-resolved direct numerical simulation data as benchmark	Chemical Engineering Science	国际刊物	240	2021 年 08 月	第二	Junwu Wang; Peng Zhao; Bidan Zhao	SCI 收录
Supersonic and near-equilibrium gas-driven granular flow	Physics of Fluids	国际刊物	32	2020 年 11 月	第二	Junwu Wang; Peng Zhao; Bidan Zhao	SCI 收录
Discrete particle method for engineering simulation: Reproducing mesoscale structures in multiphase systems	Resources Chemicals and Materials	国际刊物	1	2022 年 01 月	第二	Ji Xu; Peng Zhao; Yong Zhang; Junwu Wang; Wei Ge;	SCI 收录
Direct comparison of CFD-DEM simulation and experimental measurement of Geldart A particles in a micro-fluidized bed	Chemical Engineering Science	国际刊物	242	2021 年 05 月	第二	Shijiao Li; Peng Zhao; Ji Xu; Li Zhang; Junwu Wang	SCI 收录
CFD-DEM simulation of polydisperse gas-solid flow in micro-fluidized beds	Chemical Engineering Science	国际刊物	253	2022 年 5 月	第二	Shijiao Li; Peng Zhao; Ji Xu; Li Zhang; Junwu Wang	SCI 收录
CFD-DEM-IBM simulation of particle drying processes in gas-fluidized beds	Chemical Engineering Science	国际刊物	255	2022 年 6 月	第二	Bin Lan; Peng Zhao; Ji Xu; Bidan Zhao; Ming Zhai; Junwu Wang	SCI 收录

Scale-up effect of residence time distribution of polydisperse particles in continuously operated multiple-chamber fluidized beds			Chemical Engineering Science		国际刊物	244	2021 年 11 月	第三	BinLan; Ji Xu; Peng Zhao; Zheng Zou; Junwu Wang; Qingshan Zhu		SCI 收录
Long-time coarse-grained CFD-DEM simulation of residence time distribution of polydisperse particles in a continuously operated multiple-chamber fluidized bed			Chemical Engineering Science		国际刊物	219	2020 年 06 月	第三	BinLan; Ji Xu; Peng Zhao; Zheng Zou; Junwu Wang; Qingshan Zhu		SCI 收录
气固流化床启动阶段挡板内构件受力特性的CFD-DEM模拟			化工学报		中文核心	-	2022 年	第三	李铁男,赵碧丹,赵鹏,张永民,王军武		EI 收录
统计情况	国内刊物	1	国内会议	0	SCI 收录		12	ISTP 收录	0	EI 收录	1
	国际刊物	12	国际会议	0	SSCI 收录		0	CSCD 收录	0	核心刊物	0
	已发表论文总数		12		已正式接收论文总数			12			

审核人（签字）：

2022 年 5 月 10 日

在学期间出版专著、获得科研成果奖励及有学术价值专利情况

专著、科研奖励、专利名称			出版社、设奖部门、 专利类型及专利号		出版专著、获得 奖励、专利时间		排名	作者、获奖者、获专利者列表	
统计情况	专 著	0 篇	专 利	0 项	获国家奖		0 项	获省部奖	0 项
在学期间其他科研成果（包括完成的实际项目、编写的高质量案例、专题研究报告、调查报告、翻译文章、参与科研课题等）：									

审核人（签字）：

2022 年 5 月 10 日

课程学习及必修环节

课程学习情况	学位课程名称 (如补考用*号注明)	学分	成绩	考试时间	非学位课程名称 (如补考用*号注明)	学分	成绩	考试时间
	学术道德与学术写作规范	1.0	86	2019— 2020 学年 (秋) 第一 学期	数学物理方法	3.0	87	2016— 2017 学年 (秋) 第一 学期
	化学反应工程	3.0	85	2016— 2017 学年 (秋) 第一 学期	中国民居建筑艺术赏析	1.0	85	2016— 2017 学年 (秋) 第一 学期
	传递过程原理	3.0	94	2016— 2017 学年 (秋) 第一 学期	C++ 程序设计	1.0	80	2016— 2017 学年 (秋) 第一 学期
	流体力学导论	4.0	84	2016— 2017 学年 (秋) 第一 学期	科技信息与网络资源实用技巧	1.0	88	2016— 2017 学年 (春) 第二 学期
	中国马克思主义与当代	1.0	85	2016— 2017 学年 (秋) 第一 学期	绿色介质性质及其应用	1.0	89	2016— 2017 学年 (夏) 第三 学期
	人文系列讲座	1.0	通过	2016— 2017 学年 (秋) 第一 学期	化工新概念	1.0	90	2016— 2017 学年 (夏) 第三 学期

	中国特色社会主义理论与实践研究	1.0	82	2016— 2017 学年 (秋)第一 学期	化学实验室安全课程	1.0	82	2017— 2018 学年 秋季学期
	硕士学位英语	3.0	74	2016— 2017 学年 (秋)第一 学期				
	过程工程中的计算机应用基础	3.0	89	2016— 2017 学年 (春)第二 学期				
	流态化与多相流	2.0	87	2016— 2017 学年 (春)第二 学期				
	计算流体力学	4.0	91	2016— 2017 学年 (春)第二 学期				
	自然辩证法概论 (东区)	1.0	84	2016— 2017 学年 (春)第二 学期				
	博士学位英语	2.0	74	2016— 2017 学年 (春)第二 学期				

	课程学习总学分		38			学位课总学分			29	
同等学力人员考试情况	全国统考	外语水平考试	语种		成绩		考试日期		证书编号	
		学科综合水平考试	学科名称		成绩		考试日期		证书编号	
	中国科学院大学统一组织	学科综合考试名称			成绩				考试时间	
必修环节	开题报告		时间	年 月 日			成绩			
	中期考核		时间	年 月 日			成绩			
	学术报告及社会实践						成绩			
研究生管理部门意见	<div style="display: flex; justify-content: space-between; align-items: flex-end; padding: 10px;"> <div>审核人（签字）：</div> <div>研究生管理部门或院系（盖章）</div> </div> <div style="text-align: center; margin-top: 10px;"> 年 月 日 </div>									

学位论文题目：气固流态化离散模拟：CFD-DEM-IBM 方法			
论文关键词 (3—5 个关键词)	浸没边界法，计算流体力学耦合离散元方法，气固流化床，气-固信息相互映射	论文字数	59028
论文类型	<input type="checkbox"/> 基础研究 <input type="checkbox"/> 应用研究 <input checked="" type="checkbox"/> 综合研究 <input type="checkbox"/> 其它		
论文选题来源 (参考附件 1)	<div style="display: flex; flex-wrap: wrap;"> <div style="width: 50%;"> <input type="checkbox"/>973、863 项目 <input type="checkbox"/>教育部人文、社会科学研究项目 <input type="checkbox"/>中央、国家各部门项目 <input type="checkbox"/>国际合作研究项目 <input type="checkbox"/>企、事业单位委托项目 <input type="checkbox"/>学校自选项目 <input type="checkbox"/>非立项 </div> <div style="width: 50%;"> <input type="checkbox"/>国家社科规划、基金项目 <input checked="" type="checkbox"/>国家自然科学基金项目 <input type="checkbox"/>省（自治区、直辖市）项目 <input type="checkbox"/>与港、澳、台合作研究项目 <input type="checkbox"/>外资项目 <input type="checkbox"/>国防项目 <input type="checkbox"/>其他 </div> </div>		
<p>学位论文选题依据和意义：</p> <p>计算流体力学耦合离散元（CFD-DEM）方法已经成为探索气固流化床中流动机理的主流方法之一。然而该方法直接应用于模拟工业尺度流化床仍然存在很多不足。比如为了保证数据映射的准确性，要求流体网格长度为颗粒粒径的 3-5 倍；难以生成满足长度要求的高质量的网格。这些问题的存在极大限制了 CFD-DEM 方法的应用。不同于传统 CFD-DEM 方法采用非结构贴体网格，本研究采用正交网格模拟含有复杂构体的流化床，其中复杂构体与气体之间的相互作用通过浸没边界法施加，正交网格网格质量高，而且数据映射更加简单。此外，采用核函数方法将数据映射过程与网格长度解耦，有力推动了 CFD-DEM 方法在工业流化床模拟中的应用。</p>			
<p>学位论文研究课题所涉及前人的主要研究成果（简要说明）：</p> <p>已有研究者将浸没边界法与 CFD-DEM 方法结合用于研究气固流化床中流体力学特性，不过文献中使用基于扩散界面的浸没边界法，不能保证边界条件的准确施加。此外，本研究中所用浸没边界法已经被用于单相不可压缩体系的研究，但是由于边界条件施加过程内迭代的存在，直接用于流化床模拟计算效率较低，因此本研究对该方法进行了优化，加快了边界条件施加过程的计算速度。</p>			
<p>论文主要贡献及创新点（简要说明学术贡献或者具体解决的实际问题）：</p> <p>本研究的主要创新点如下：</p> <p>（1）通过去除插值重构过程中未知的 IB 网格避免内迭代，优化了浸没边界法边界重构计算速度，此外新增一阶压力零梯度边界条件的施加方法，进一步加速了压力边界条件施加速度。</p> <p>（2）将基于锐利界面的浸没边界法与 CFD-DEM 方法耦合，并将不可压缩的 CFD-DEM-IBM 方法拓展至包含传热以及化学反应过程的可压缩方法，用于模拟真实工业过程。</p> <p>（3）使用网格无关的核函数方法耦合质心法用于局部加密网格中离散颗粒信息与流体网格之间的相互映射，保证模拟准确性的同时显著提高计算效率。</p>			

学位论文中文摘要

气固流化床广泛应用于矿物加工、制药、能源等领域。这些流化床普遍包含复杂几何构体（如内构件等），并且复杂构体会显著影响流化床内部的“三传一反”特性。因此，如何设计以及优化含有复杂构体的流化床至关重要。近年来，随着计算机技术的快速发展，数值模拟成为设计以及优化流化床的重要手段。由于计算流体力学耦合离散元方法（CFD-DEM）能在模拟中保持颗粒的离散特性，已经成为模拟流化床的主流方法之一。

CFD-DEM 方法模拟实验室规模具有简单几何构体的流化床已经比较成熟，但是使用该方法模拟工业尺度流化床还存在以下两个问题：（1）如何生成满足长度要求的高质量网格；（2）如何将流体网格长度和 CFD-DEM 方法中相间耦合过程解耦，使 CFD-DEM 方法使用不受限于网格长度。

本研究致力于解决这两个问题。对于问题 1，不同于传统 CFD-DEM 方法使用非结构贴体网格模拟含有复杂几何构体的流化床，本研究使用非贴体的正交网格，其中复杂构体与气体之间的相互作用通过浸没边界法（IBM）施加。高质量的正交网格可以保证模拟精度同时，降低相间信息映射的难度。OpenFOAM 中的 IBM 由于内迭代的存在，计算效率低。本研究提出在重构边界流场时剔除邻近 IB 网格的影响，可以在保证计算精度不变的情况下通过消除内迭代的方式大幅提高计算效率（可提高 62 倍左右）。将优化后的浸没边界法与 CFD-DEM 方法耦合，通过研究含有复杂构体流化床内流体力学特性验证该方法的准确性。为了准确模拟操作条件变化剧烈的反应器，本研究将不可压缩 CFD-DEM-IBM 方法拓展为包含气-固热传导的可压缩方法，通过模拟埋管流化床内的热传导，验证了可压缩 CFD-DEM-IBM 方法模拟结果的合理性。化工过程常常伴随传质与化学反应过程，当前研究在 CFD-DEM-IBM 方法中加入传质与化学反应模块，通过模拟臭氧分解反应来验证该模块的准确性。

传统 CFD-DEM 方法中，气-固相间信息映射过程与网格长度相关，为了保证相间信息映射的准确性，要求网格长度为颗粒粒径的 3-5 倍，这限制了 CFD-DEM 方法的应用。因此，对于问题 2，本研究对比了八种将离散信息映射到流体网格方法，选用网格无关的核函数进行细网格下气-固相间的信息映射，将相间信息映射过程与网格长度解耦。此外，对于局部加密网格，本研究使用质心法耦合核函数方法进行相间信息映射，兼顾了计算效率与准确性。使用局部加密网格模拟埋管流化床验证了该方法的准确性以及计算效率。

本论文建立了采用笛卡尔网格模拟复杂工业流化床内流动-传热-反应的 CFD-DEM-IBM 方法，并将网格长度与相间信息映射过程解耦，使具备网格局部加密的功能，有力推动了 CFD-DEM 方法在工业流化床模拟中的应用。未来将实现动边界以及复杂反应过程的模拟。

学位论文英文摘要（中文摘要的直译）

Gas-solid fluidized beds are widely used in the fields of mineral processing, pharmaceutical industry and energy. These fluidized beds usually have complex geometries (such as internal components, etc.), and complex geometries affect significantly the “transport and reaction” characteristics inside the fluidized bed. Therefore, it is vital to properly design and optimize fluidized beds with complex geometries. Recently, with the rapid development of computer technology, numerical simulation has become an important means of designing and optimizing fluidized beds. Among them, the computational fluid dynamics coupled discrete element method (CFD-DEM) can maintain the discrete characteristics of particles in the simulation, and has become one of the mainstream methods for simulating fluidized beds.

The CFD-DEM method is relatively mature in simulating laboratory-scale fluidized beds with simple geometries, but using this method to simulate industrial-scale fluidized beds still has the following two problems: (1) how to generate high-quality grids that meet length requirements; (2) how to decouple the length of fluid grid and the interphase coupling process in the CFD-DEM method, so that the CFD-DEM method is not limited by the length of grid.

This study aims to address both of these problems. For problem 1, unlike traditional CFD-DEM methods that use unstructured body-fitted grids to simulate fluidized beds with complex geometries, this study uses non-body-fitted orthogonal grids, where interactions between complex geometries and gases are imposed by the immersed boundary method (IBM). High-quality orthogonal grids can ensure the simulation accuracy and reduce the difficulty of interphase information mapping. The IBM in OpenFOAM is computationally inefficient due to the existence of inner iterations. This study proposes to eliminate the influence of adjacent IB grids when reconstructing the flow fields near boundaries, which can greatly improve the computational efficiency (about 62 times) by eliminating inner iterations while keeping the computational accuracy unchanged. The optimized immersed boundary method is coupled with the CFD-DEM method, and the accuracy of CFD-DEM-IBM method is verified by studying the hydrodynamic characteristics of the fluidized bed with complex geometries. In order to accurately simulate reactors with drastically changing operating conditions, this study extended the incompressible CFD-DEM-IBM method to a compressible method involving gas-solid heat transfer, and the simulation results of the compressible CFD-DEM-IBM method are validated by simulating the heat transfer in the fluidized bed with immersed tube. Chemical processes are often accompanied by mass transfer and chemical reaction processes. In the current study, a mass transfer and chemical reaction model is added to the CFD-DEM-IBM method, and the accuracy of this model is verified by simulating the ozone decomposition.

In the traditional CFD-DEM method, the information mapping process between the gas and solid phase is related to the length of grids. In order to ensure the accuracy of interphase information mapping, the length of grids is required to be 3-5 times the particle diameter, which limits the application of the CFD-DEM method. Therefore, to address problem 2, this study contrasts eight methods for mapping discrete information to fluid grids. A grid-independent kernel function is used to map the gas-solid phase information under fine grids, and the interphase information mapping process is decoupled from the length of grids. In addition, for grids with local refinement, this study uses the particle centroid method coupled with the kernel function method to map the interphase information, taking into account the computational efficiency and accuracy. The accuracy and computational efficiency of this mapping method are verified by simulating a fluidized bed with immersed tubes using grids with local refinement.

In this study, a CFD-DEM-IBM method for simulating flow-heat-transfer-reaction in industrial fluidized bed including complex geometries using Cartesian grids is established, and by decoupling the length of grids and interphase information mapping process, it has the function of local grid refinement, which strongly promotes the application of CFD-DEM method in simulation of industrial fluidized beds. The simulation of moving boundaries and complex reaction processes will be implemented in the future.

指导教师对学位论文的学术评语及对申请人的综合评价

导师评语：（限 1200 字）

- 1、对论文的学术评语（论文选题意义；对文献资料掌握程度；所用资料、实验结果和计算数据的可靠性；论文的创造性成果；综合运用所学理论知识解决实际问题的能力和水平、新见解及应用价值；写作规范化、逻辑性；论文的不足之处等）。
- 2、对申请人的基础理论、专门知识、外语水平、科研能力或行业实践的能力及学风的综合评价等。

本论文聚焦解决经典 CFD-DEM 方法用于工业流化床模拟中碰到的挑战性问题：如何用笛卡尔网格实现具有复杂几何结构流化床的模拟。选题具有重要的实用价值。论文作者文献掌握全面，具备非常优秀的解决实际问题的能力。论文提出一种新的锋锐界面浸没边界法，实现了复杂流化床内气固两相流的流动-传热-化学反应的模拟，并提出了一种质心法和权函数耦合方法实现优化计算效率与模拟精度的气固相间映射方法，去除了传统 CFD-DEM 方法中对网格长度的要求，大幅拓展了该方法的适用范围。论文写作规范，逻辑性强，是一篇优秀的博士学位论文。赵鹏同志在学期间，成绩优秀，学风端正，科研工作勤恳踏实，品德优良，具有团结协作精神。掌握扎实的相关数学理论知识，英语好，在研究工作方面取得了突出的研究成果。

是否同意答辩：同意答辩

导师（签字）： 王斌

2022 年 5 月 10 日

所在实验室审定意见

对申请人的评价（思想、学习、工作表现、论文是否由本人独立完成和是否同意论文答辩等）：

赵鹏同学在学期间思想上积极向上，学习认真努力，工作踏实认真。学位论文是本人独立完成，同意博士学位论文答辩。

负责人（签字）：



研究室、院系（公章）

2022 年 05 月 10 日

所在院系审定意见

对申请人的评价（思想、学习、工作表现、论文是否由本人独立完成和是否同意论文答辩等）：

负责人（签字）：

研究室、院系（公章）

年 月 日

学位论文评阅人审核表

评阅人姓名	专业技术职务	是否博导	研究领域	工作单位

研究所学位评定委员会审核意见:

培养单位学位评定委员会主席（签字）:

培养单位学位评定委员会（公章）

年 月 日

附表 1 论文选题来源对照表

代码	名称	对应项	代码	名称
02	973、863 项目		04	国家社科规划、基金项目
05	教育部人文、社会科学研究项目		06	国家自然科学基金项目
07	中央、国家各部门项目	重点研发计划项目	09	省（自治区、直辖市）项目
		国家重大专项项目	13	与港、澳、台合作研究项目
12	国际合作研究项目		15	外资项目
14	企、事业单位委托项目		17	国防项目
16	学校自选项目	中科院重大项目	99	其他
90	非立项			