

GH 现代化学专著系列·典藏版 19

# 颗粒流体复杂系统的 多尺度模拟

李静海 欧阳洁 高士秋 著  
葛蔚 杨宁 宋文立



科学出版社

国家科学技术学术著作出版基金资助出版

现代化学专著系列·典藏版 19

# 颗粒流体复杂系统的 多尺度模拟

李静海 欧阳洁 高士秋 著  
葛蔚 杨宁 宋文立

科学出版社

北京

## 内 容 简 介

本书概述了颗粒流体系统的基本概念以及颗粒流体系统模拟的基础知识,阐述了颗粒流体系统的复杂性及其多尺度结构,总结了作者多年来在颗粒流体复杂系统多尺度模拟方面的工作,展望了颗粒流体系统多尺度模拟研究的发展趋势。详细介绍了颗粒流体系统多尺度模拟的能量最小多尺度模型、双流体模型、确定性颗粒轨道模型以及拟颗粒模拟的基本原理、基本方法以及相应的数值计算技术,并给出了上述多尺度模拟方法在工业应用中的一些成果。

本书可供化工、冶金、能源、材料、环保等过程工程相关领域从事颗粒流体系统计算的科研人员、工程技术人员,以及高等院校相关专业的研究生和高年级本科生参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

现代化学专著系列:典藏版/江明,李静海,沈家骢,等编著. —北京:科学出版社,2017.1

ISBN 978-7-03-051504-9

I. ①现… II. ①江… ②李… ③沈… III. ①化学 IV. ①O6  
中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 013428 号

责任编辑:李 锋 朱 丽 吴伶俐 王国华/责任校对:包志虹

责任印制:张 伟/封面设计:铭轩堂

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京教图印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销



2017年1月第一版 开本:720×1000 B5

2017年1月第一次印刷 印张:21 3/4

字数:420 000

定价:7980.00元(全45册)

(如有印装质量问题,我社负责调换)



## 序

20世纪50年代,我初来中国科学院化工冶金研究所(中国科学院过程工程研究所前身)工作,从事含铜铁矿的硫酸化流态化焙烧和贫铁矿的磁化流态化焙烧的研究。这两种流态化焙烧都需要预热大量矿石并从中回收热量。传统的鼓泡流态化中气固接触差、其浓相床压降大、需要鼓风能耗高,又不易建立温度梯度,于是我们都采用稀相换热。虽然,稀相流态化中固体颗粒分布不匀为众所观察到的现象,我们也为此设计了多种颗粒分布装置,但是,人们对稀相中存在的浓相聚团的科技涵义认识不足,而且在繁忙的工业化试验中无暇顾及摆在面前的这一科技新方向。

60年代,德国的Reh教授在他的学位论文中,以细粉中能通过远大于颗粒自由沉降速度的气流为契机,开发了现代的循环流态化技术。同时,美国的Squires教授也进行了循环流态化的试验研究。70年代,我们考虑将这一技术用于钒钛铁矿的先提铁后提钒钛的工艺,先将铁矿还原到金属,再通过熔化分离,富集钒钛。当时中国科学院已开始考虑科学院的工作与产业研究分工,多从事基础性的工作。我们提出了循环流态化中快速床的一维空间孔隙率分布模型,颇受业界重视。

循环流态化和稀相流态化同属无气泡流态化体系。在中国科学院加强基础研究的形势下,我们决定优先从事无气泡气固接触的研究。无气泡气固系统中,固体颗粒既可单体分散存在,也能聚团,两者迅速交替,提高了气固接触,其特征是聚团。80年代,该书作者之一李静海来到了中国科学院化工冶金研究所,从事无气泡气固接触的研究,在通常考虑的颗粒和设备之间插入了颗粒聚团,对这三个尺度的有关属性及其关系写出了一组公式,发现制约条件少于列出的参数;经过长久考虑,提出了某种能耗——稳定的气固系统要求这种能耗趋于最小。

李静海的研究以三篇论文的形式发表于1988年在法国召开的第二届国际循环流态化会议,引起了业界莫大兴趣,后来又于1994年出版了专著: *Particle-Fluid Two-Phase Flow—the Energy-Minimization Multi-Scale Method*。书中所提出的EMMS方法,已用于设备和工艺设计,并对颗粒流体系统的研究提供了有用的概念,特别是将现象悬殊的、以气固为主的聚式流态化和以液固为主的散式流态化统一到同一模型基础中。

该书可看作上述专著的后续,着重模型和模拟。本书第1~4章集中叙述EMMS模型及有关的基础知识,第5~7章将双流体模型、颗粒轨道模型、拟颗粒模拟归并到多尺度范畴,第8章介绍了多尺度模拟方法的工业应用,第9章阐

述了作者的回顾与体会。

多尺度现象普遍存在于工业，甚至自然界。作为展望，第9章试图将颗粒流体复杂系统多尺度模拟与其他工业和自然科学界的复杂系统沟通，以利于汲取有用的类似研究成果和输出颗粒流体复杂系统多尺度的研究成果。

经过20年的工作，作者对颗粒流体复杂系统的研究已初具自己的体系，并形成了团队，实属可喜。希望继续努力，对应用科学和复杂系统做出进一步的贡献。

郭慕孙

2004年12月

## 前 言

颗粒流体系统渗透在人们的日常生活、工业过程、生态环境等各个方面，它与提高人类生活水平、发展国民经济密切相关。颗粒流体系统的多尺度研究涉及与物质转化过程相关的所有工程领域以及数学、力学、物理等诸多领域，属于跨学科、跨领域的研究范畴。然而，鉴于颗粒流体系统的复杂性及其实验手段的局限性，目前计算机模拟已成为颗粒流体系统多尺度研究的有力工具，并在相关工业过程的模拟仿真研究中发挥着举足轻重的作用。

本书遵循多尺度方法研究复杂系统的基本思路，以时空多尺度结构与稳定性条件为核心，介绍了颗粒流体系统的一般知识以及复杂性或多尺度研究的基本概念，阐述了多尺度模拟的各类模型以及模拟计算的基本方法，总结了作者在颗粒流体系统多尺度模拟方面的研究成果，并结合最近这一领域出现的一些新动态，讨论了颗粒流体系统模拟计算的发展趋势以及现有方法的不足和缺陷。

全书共分为 9 章，第 1 章和第 9 章分别为本书的导论和回顾与体会；第 2 章和第 3 章分别介绍了颗粒流体系统的基本概念以及颗粒流体系统数值模拟的基础知识；第 4 章至第 7 章分别介绍了基于不同尺度、不同原理的能量最小多尺度模型、双流体模型与 EMMS 模型的结合、确定性颗粒轨道模型和拟颗粒模拟；第 8 章介绍了若干多尺度模拟方法的工业应用。其中第 1 章、第 2 章和第 9 章由李静海撰写，第 3 章和第 6 章由欧阳洁撰写，第 4 章由高士秋撰写，第 5 章由杨宁撰写，第 7 章由葛蔚撰写，第 8 章由宋文立撰写。书稿的组织、统稿以及出版基金的申请等工作由欧阳洁和高士秋完成。

本书反映了作者所在的课题组多年来的研究成果。从 1984 年李静海师从郭慕孙院士开始，已整整 20 年。在这些年的研究过程中，郭先生指导了我们的研究工作，董元吉、钱贵华、许光文、陈爱华、白蕴如、袁捷、张忠东、别如山、阎周琳、文利雄、张余勇、张思军、孙国刚、崔和平、李杰、郭有良、任金强、孙其诚、徐有宁、韩龙、程从礼、刘明言、王琳娜、张家元、赵辉、麻景森、李廷华等同志先后参加过本书所涉及的研究工作。王京平、陈燕和练子丹同志在课题组工作过。赵晓力同志协助完成了部分书稿的文字输入及图形绘制工作，侯超锋、鲁波娜以及孟凡勇等同学仔细阅读了本书的全部初稿并提出了宝贵意见。赵凤茹、赵兰英同志长期在课题组承担文秘工作。因此，本书是集体智慧和艰辛劳动的结果。值本书出版之际，我们对为本书出版而做出贡献的所有同志表示诚挚的谢意。

最后，我们由衷地感谢郭慕孙院士，他在指导这一研究工作的同时，还在百

忙中对全书进行了审阅，并提出了许多宝贵的意见。瑞士联邦理工学院 Lothar Reh 教授多年来一直支持这方面的工作，并为实验验证工作提供了良好的条件。我们也衷心感谢国家自然科学基金委员会对我们工作持续多年的资助，感谢国家科学技术学术著作出版基金对本书出版的支持。

本书在总结作者多年科研工作的基础上，提出了一些值得探索的问题，并展望了颗粒流体系统多尺度研究的发展趋势。作者希望本书的出版能对颗粒流体系统多尺度的模拟研究向纵深发展起到积极的促进作用。由于作者水平有限，特别是对一些问题的研究尚属探索阶段，因此本书难免有一些不准确、不全面甚至错误的地方，在敬请读者原谅的同时，我们非常希望读者能将本书不足之处反馈给我们，以便今后更正。

作者

2004年12月



# 目 录

序

前言

第 1 章 导论 .....	1
1.1 颗粒流体系统的重要性 .....	1
1.2 颗粒流体系统的复杂性及其多尺度结构 .....	2
1.3 现有模拟方法的不足 .....	4
1.4 多尺度方法介绍 .....	7
1.5 本书的结构和指导思想 .....	9
参考文献 .....	10
第 2 章 颗粒流体系统的基本概念 .....	12
2.1 基本现象 .....	12
2.2 流动结构中的非均匀性 .....	15
2.2.1 局部非均匀性 .....	15
2.2.2 整体非均匀性 .....	18
2.3 状态多值性 .....	22
2.4 耗散结构的性质 .....	23
2.5 流化系统中的术语 .....	25
2.6 颗粒流体两相流中的参数 .....	27
2.6.1 独立参数 .....	28
2.6.2 相关参数 .....	31
2.6.3 定性参数 .....	32
2.6.4 导出参数 .....	34
符号说明 .....	34
参考文献 .....	35
第 3 章 颗粒流体系统数值模拟的基础知识 .....	37
3.1 颗粒流体系统计算模型概述 .....	37
3.1.1 计算模型的分类与简介 .....	37
3.1.2 各类模型的特点及问题 .....	39
3.2 流体力学基本方程组 .....	40
3.2.1 预备知识 .....	41
3.2.2 Reynolds 输运定理 .....	43

3.2.3	连续方程	44
3.2.4	动量方程	45
3.2.5	能量方程	47
3.3	湍流模拟简介	51
3.3.1	湍流的描述	51
3.3.2	湍流时均模型	52
3.3.3	模拟湍流的其他方法	56
3.4	偏微分方程求解的数值方法	58
3.4.1	网格化方法及离散化方法	59
3.4.2	有限差分法	61
3.4.3	有限体积法	66
3.4.4	SIMPLE 算法及其改进的算法	69
3.5	颗粒动力学	78
3.6	结束语	83
	符号说明	83
	参考文献	85
<b>第 4 章</b>	<b>能量最小多尺度模型</b>	<b>87</b>
4.1	概述	87
4.2	EMMS 模型的建立	88
4.2.1	多尺度分析	88
4.2.2	系统分解和能量分析	90
4.2.3	流体动力学方程	93
4.2.4	颗粒流体系统的稳定性条件	99
4.2.5	EMMS 模型	101
4.3	EMMS 模型的求解	102
4.3.1	数值解	103
4.3.2	解析解	107
4.3.3	流动区域过渡	113
4.3.4	最大空隙率的确定	117
4.4	EMMS 模型的扩展与应用	121
4.4.1	轴向动力学	122
4.4.2	径向动力学	131
4.5	结束语	135
	符号说明	136
	参考文献	138

<b>第 5 章 双流体模型与 EMMS 模型的结合</b> .....	142
5.1 概述 .....	142
5.2 基本方程组 .....	144
5.2.1 推导过程 .....	144
5.2.2 基本方程的不同形式 .....	154
5.3 气固相应力的本构方程 .....	155
5.3.1 经验关联式 .....	156
5.3.2 颗粒动力学理论 .....	157
5.4 气固相间作用关系式 .....	160
5.4.1 实验关联方法 .....	160
5.4.2 平均化方法的不足和解决思路 .....	164
5.4.3 能量最小多尺度方法 .....	166
5.5 计算方法与商业软件 .....	175
5.6 模拟举例 .....	177
5.6.1 鼓泡流化床的模拟 .....	177
5.6.2 循环流化床的模拟 .....	179
5.7 结束语 .....	189
符号说明 .....	192
参考文献 .....	194
<b>第 6 章 确定性颗粒轨道模型</b> .....	200
6.1 颗粒运动的研究概况 .....	201
6.1.1 悬浮过程 .....	201
6.1.2 碰撞过程 .....	204
6.2 流体运动的研究概况 .....	217
6.3 气固相间耦合关系的研究概况 .....	218
6.4 确定性颗粒轨道模型中数值计算技术的研究概况 .....	219
6.4.1 二维空隙率与三维空隙率转换关系的研究概况 .....	219
6.4.2 颗粒碰撞事件确定技术的研究概况 .....	221
6.5 颗粒碰撞模型的比较 .....	222
6.6 确定性颗粒轨道模型的应用示例 .....	223
6.6.1 数学模型 .....	224
6.6.2 数值方法 .....	229
6.6.3 模拟示例 .....	233
6.7 结束语 .....	242
符号说明 .....	243
参考文献 .....	245

<b>第 7 章 拟颗粒模拟</b> .....	250
7.1 拟颗粒模拟提出的背景 .....	250
7.1.1 连续介质方法的局限性 .....	250
7.1.2 微观模拟方法的发展 .....	251
7.2 拟颗粒模型的建立 .....	253
7.2.1 基本思想 .....	253
7.2.2 模型的建立 .....	256
7.2.3 拟颗粒的物性估计 .....	258
7.2.4 模型的检验 .....	259
7.2.5 应用举例 .....	268
7.3 宏观拟颗粒模拟 .....	273
7.3.1 基本思想 .....	273
7.3.2 模型的检验与分析 .....	276
7.3.3 应用举例 .....	278
7.4 离散模拟的通用计算平台 .....	280
参考文献 .....	283
<b>第 8 章 多尺度模拟方法的工业应用</b> .....	286
8.1 双循环变径提升管反应器的辅助设计 .....	286
8.1.1 计算条件和参数 .....	286
8.1.2 各段噎塞计算 .....	288
8.1.3 模拟计算结果及讨论 .....	291
8.1.4 小结 .....	299
8.2 浆态床运行参数和结构的优化 .....	299
8.2.1 气泡直径的预测 .....	300
8.2.2 实验结果验证 .....	304
8.2.3 环流反应器的结构优化 .....	305
8.2.4 小结 .....	308
8.3 磁力偏析布料装置的优化 .....	308
8.3.1 模拟方法及数学模型 .....	308
8.3.2 磁场布置方案及其磁场分布 .....	311
8.3.3 数值计算和实验结果与讨论 .....	312
8.3.4 新型偏析布料装置 .....	318
8.3.5 小结 .....	320
符号说明 .....	322
参考文献 .....	323

第 9 章 回顾与体会 .....	325
9.1 回顾 .....	325
9.2 对复杂系统研究的体会 .....	329
符号说明 .....	333
参考文献 .....	333

# 第 1 章 导 论

本章介绍了颗粒流体系统在自然界中的普遍性和在国民经济中的重要性，并以时空多尺度结构为核心，从复杂性科学的角度讨论了颗粒流体系统的复杂性。结合最近这一领域出现的一些新动态，本章还讨论了颗粒流体系统模拟计算的发展趋势及现有方法的不足和缺陷，介绍了多尺度方法研究的必要性和优势，归纳了本书的指导思想。

## 1.1 颗粒流体系统的重要性

自然界的物质呈气体、液体和固体三种状态：气体和液体统称为流体；固体一般都以颗粒的形态存在，并与流体发生相互作用。因而，颗粒流体系统是自然界和工业过程中最普遍的一种现象，无形中影响着人类的生存和生活环境。大到工业生产、气候变化、河流运动和大气污染，小到人的呼吸和血液流动，无不与颗粒流体系统密切相关。

颗粒流体系统与工业过程的关系就更加明显。根据我国工业分类，整个工业体系由 37 个行业构成。如按其技术特点归类，可分为两大类：一类是以物质的化学和物理转化为核心的过程工业，其产品一般计量不计件，其产值约占 GDP 的 16%；另一类是以改变物质形状大小为核心的装备产品制造业，其产品一般计件不计量。过程工业的技术特征是物质在发生物理和化学转化过程中物质的运动、传递和反应，而颗粒流体系统是物质运动、传递、反应的基础，因此颗粒流体系统是过程工业的核心。另外，装备制造业也涉及很多颗粒流体系统的问题。煤的利用、石油和天然气的加工、炼钢炼铁、水泥、化肥和各种粉末材料的生产过程，都是在颗粒流体系统中完成的。事实上，各种资源利用、能源转换和环境保护都涉及各种各样的颗粒流体系统。化工过程中存在的放大效应，多数也与颗粒流体系统密切相关。

与此同时，高新技术的发展，也扩展了颗粒流体系统研究的范畴，如纳米材料的制备和加工、微化工系统、电子元器件的生产、生物的代谢过程、自组装等，都涉及非传统的颗粒流体系统。

由此可见，颗粒流体系统渗透在人们的日常生活、工业过程、生态环境等各个方面。它与提高人类生活水平、发展国民经济密切相关。

颗粒流体系统的研究不仅具有重大的应用背景，同时也具有潜在的科学意义。湍流是大家公认的 20 世纪没有解决的科学难题之一。颗粒流体系统中除存

在湍流现象外，还增加了颗粒与流体的相互作用，更加复杂。加深对颗粒流体系统的认识不仅对于提升传统产业、发展高新技术，而且对于发展复杂性科学均具有重要意义。

## 1.2 颗粒流体系统的复杂性及其多尺度结构

自然界中多数现象都具有非线性非平衡特征。一般来讲，这些现象均受两种以上作用机理共同控制，并常常呈现非均匀的耗散结构。非线性非平衡系统不存在普适单一的极值条件<sup>[1]</sup>，因而这类系统的量化很难实现，并逐步成为工程界和学术界研究的焦点，从而出现了复杂系统这一概念，导致复杂性科学的产生。颗粒流体系统是一种典型的复杂系统，表现出非线性系统的所有共同特征，如颗粒和流体的自组织、分岔现象和混沌行为等。像所有耗散结构<sup>[2]</sup>一样，通过流体输入系统的能量大部分用于维持系统内非均匀的两相耗散结构，只有一小部分用于输送颗粒的可逆过程。流动结构由于自组织而表现为流体富集的稀相和颗粒聚集的密相共存，伴有非常复杂的动态变化，并随操作条件的改变在某些临界条件下会发生突变或转折性变化。为了认识这一过程，首先必须确认：什么因素对系统行为起控制作用？如何用简单的方法来描述复杂的现象？既然是非线性过程，那么除上述一些非线性系统共性的特征外，控制这一过程的特殊机理是什么？

事实上，颗粒流体系统中所有现象都是流体和颗粒这两种独立介质相互作用的结果。两介质必然各有其独立的运动趋势，直接用统一的规律描述两种介质不同的趋势难度很大；另外，耗散结构中存在多尺度相互作用和多种过程的耦合，用平均参数难以反映系统的内在机理。可行的途径是先分析各过程及某一尺度的、独立的变化规律，然后综合考虑不同过程之间的耦合和不同尺度之间的关联，构成对系统的总体认识。

颗粒流体系统还有一个突出特征是存在放大效应，表面上表现为设备规模改变导致过程行为剧变。然而，其内在机理却是规模变化导致流动结构改变，从而引起过程行为的剧变。因而，认识其结构特征十分重要，尽管产生结构的根源在于基本单元之间的相互作用，但在不同尺度上表现的现象及其控制机理却截然不同。因而，任何基于基本单元尺度（如颗粒尺度）以上的平均都会掩盖系统内某一方面的机制。

对物质转化过程的认识，可分为如图 1-1 所示的三个层次：①分子与超分子层次，包括原子、分子、分子簇、自组织结构 and 催化剂颗粒，化学和物理主要研究这一层次。②反应器层次，包括化学工程研究的单颗粒、聚团、设备单元和不同设备构成的反应系统，一个化工多相反应系统，在系统尺度上存在物料、温度、压力、流速等参数的分布；在设备内各反应物及产物可能存在复杂的轴向和径向分布；在更小的尺度上则存在颗粒聚团和反应器局部浓度、温度梯度；在聚

团内部的介观尺度上颗粒浓度以及反应物、产物浓度会与聚团外有很大的不同；而颗粒本身则有可能是由具有高度自组织微观结构的微小单元组成。过程工程主要在这一层次上开展工作。③生态环境层次，包括工厂、环境生态、大气等，系统生态学主要研究这一层次。目前，这三个层次有融合交叉的趋势，化学和物理与化工的交叉出现了产品工程，化工与系统科学的交叉出现了过程系统工程。尽管这三个层次相对独立，但其共性的难题是结构，这些结构均具有如下特征：

- (1) 由许多单元构成，并相互作用；
- (2) 热力学意义上，系统是开放的，并通过与外界交换能量、物质和信息以维持稳定；
- (3) 每一层次上都具有多尺度特征；
- (4) 由两个以上控制机制控制，表现出很强的非线性非平衡性。

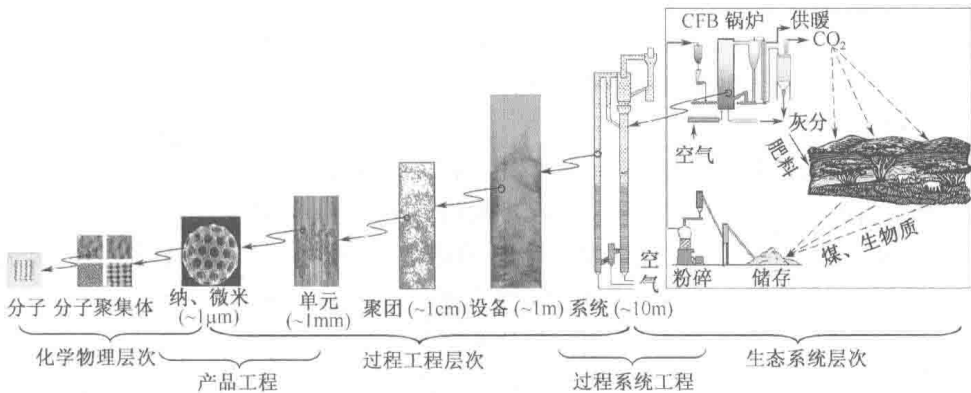


图 1-1 物质转化多层次的时空多尺度结构

此外，这些结构表现出非常复杂的变化，比如：反应器层次上的结构随时间发生动态变化；在某一临界条件下，结构发生突变；随设备尺寸的变化，会发生放大效应等。多尺度结构的出现，尤其是径向分布，会使反应器内各局部的工艺条件偏离物质转化所需的最佳工艺条件，导致反应效率下降和副反应的发生。另外，结构的产生也对某些过程具有正面的促进作用，如能加速混合、促进温度均匀等。因此，认识多尺度结构的形成及其变化规律，并建立对多尺度结构进行定向调控的方法，是过程工程科学的核心问题，也是解决实验室成果向产业化过渡的关键。一般认为，复杂性科学的发展，将打破各学科和领域的界线，实现科学的集成，还原论的研究将与整体论结合，实现不同领域和学科的统一。

从图 1-1 可以看出，贯穿整个物质转化工艺（化学和物理）、过程和生态系统三个层次的复杂性均为多尺度结构，并且，这三个层次尽管具有各自独立结构产生的机制，但多层次之间又相互耦合和关联。因此，结构及其不同层次之间的



关联是 21 世纪挑战性的前沿课题之一。对结构及其多层次多尺度特征的认识,必将引起各学科和各领域的革命性进步。

随着复杂性科学的兴起以及计算机模拟方法和技术的发展,出现了两个方面的进步:一方面,人们逐步认识到颗粒流体系统是自然界一种典型的复杂系统,其中颗粒/流体、颗粒/颗粒等非线性非平衡相互作用,导致了复杂的耗散结构。这种结构无法用通常的理论来认识,也不像平衡结构和线性非平衡过程那样存在普适的稳定性判据。因而这类系统的研究逐步纳入了复杂系统或复杂性科学的范畴。另一方面,人们建立了各种各样的模拟方法,用计算机模拟复现、研究颗粒流体系统中的复杂结构。这些进展都预示着在不久的将来,会有一个突破性的飞跃,但必须解决以下难题:

(1) 不同尺度之间的关联。非线性非平衡作用导致不同尺度现象的差异。正是这些差异的产生,才使得系统能够稳定存在。因此,不同尺度现象之间存在着复杂的相互关系。独立研究各个尺度是行不通的,描述型的多尺度方法也无法研究这一问题。必须运用极值型和关联型多尺度方法<sup>[3,4]</sup>,才能认识不同尺度之间的关联。

(2) 不同控制机制的协调。如果某一控制机制能够独立地实现其极值趋势,系统内将不会出现多尺度结构;多尺度结构的产生是不同控制机制在实现各自极值趋势的过程中相互协调的结果。为此,认识控制机制的协调是认识系统内复杂结构稳定性条件和非线性非平衡特征的关键。

(3) 时空多尺度之间的耦合。复杂系统内的多尺度结构是一种动态结构,即表现出时间和空间两个方面的多尺度特征。这两个方面的耦合是认识复杂系统的又一难点所在。事实上,空间多尺度结构是控制机制的协调在某一时刻的表现方式,而结构的时间多尺度变化则是这种协调表现出来的一种过程。

(4) 结构突变。控制机制的协调导致结构的产生,而这种协调的破坏,即某一控制机制对其他控制机制的遏制,则会导致结构的消失。在工程中,结构的突变可能会导致灾难性的后果。因此,认识结构突变是重要的研究内容之一。

总之,颗粒流体系统中的复杂性(表现为耗散结构)及其多尺度特征是当代化学工程研究的前沿性问题之一。这方面的任何进步,都将有效推动化学工程的发展,并对复杂性科学做出示范性贡献。

### 1.3 现有模拟方法的不足

分析颗粒流体系统中复杂的多尺度结构有以下三种可能的途径:

(1) 简单平均。假设该体积内没有结构形成,即颗粒均匀分布在这一体积当中并与流体作用均等。

(2) 多尺度结构分析。考虑这一体积内必然存在的非均匀结构及其多尺度特