

Towards Mesoscience

The Principle of Compromise in Competition (Springer 2014) 中文版

探索介科学

竞争中的协调原理

李静海 黄文来◎著



科学出版社

Towards Mesoscience

The Principle of Compromise in Competition (Springer 2014) 中文版

探索介科学

竞争中的协调原理

李静海 黄文来◎著

科学出版社

内 容 简 介

此书是 *Towards Mesoscience — The Principle of Compromise in Competition* 一书的中文版。简要介绍了针对气-固流态化系统中非均匀结构的能量最小多尺度 (EMMS) 模型的提出、验证、推广与应用, 并通过归纳共同规律, 最后提出介科学 (介尺度科学) 的过程。也展望了通过介科学的突破, 实现虚拟过程工程的前景。

由于介于单元尺度和系统尺度之间的介尺度结构是各个领域共同面临的挑战性问题, 此书对从事科学研究与工程技术的人员均有参考意义。特别对于化学工程领域的研发人员、研究生和本科生, 更具参考价值。

图书在版编目 (CIP) 数据

探索介科学: 气-固流态化原理/李静海, 黄文来著. —北京: 科学出版社, 2014

ISBN 978-7-03-041811-1

I. ①探… II. ①李… ②黄… III. ①系统科学 IV. ① N94

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2014) 第 203146 号

责任编辑: 杨 震 刘 冉 / 责任校对: 邹慧卿

责任印制: 赵德静 / 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>

中国科学院印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2014 年 9 月第 一 版 开本: 720×1000 1/16

2014 年 9 月第一次印刷 印张: 5 1/2

字数: 70 000

定价: 80.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

From Multiscale Modeling to Meso-Science
— *A Chemical Engineering Perspective*

一书之中文简本

中文版前言

介尺度现象随处可见。当人们研究问题时,一般而言,这些问题的对象是由众多基本单元构成的系统。比如化工催化反应器系统往往可以看成是由无数个催化剂颗粒单元构成的。介于单元尺度和系统尺度之间的复杂现象就称为介尺度现象。介科学 (Mesoscience) 或介尺度科学就是要探索这些介尺度现象的共同规律。这里的介尺度是一个广义的相对的概念,可以有不同层次、不同类型的介尺度问题,其中物理上的介观尺度仅是其中一类。

此书是 *Towards Mesoscience — The principle of Compromise in Competition* 一书 (<http://www.springer.com/materials/mechanics/book/978-3-642-41789-4>) 的中文版。旨在为中文读者提供了解介科学初步概念的方便,以鼓励更多的有兴趣的读者参与到这一新概念的讨论中来。

此书的字句表达并不拘泥于与原书的完全对应,而是依据具体内容使用合理的中文表述。此外,基于对相关问题的最新理解和认识,还作了少许修订。对详细内容有兴趣的读者,可参阅原专著 *From Multiscale Modeling to Meso-Science — A Chemical Engineering Perspective* (<http://www.springer.com/materials/mechanics/book/978-3-642-35188-4>) 。

感谢 Springer 和科学出版社的支持。此书内容是由化学工程师在解决不同具体工程实际问题过程中初步归纳共同规律而成,一方

面，所涉及的一些概念还很初步，或者存在片面性和局限性，需要逐步积累更多实例予以验证；另一方面，所涉及理论问题的一些表述可能并不确切，希望读者予以指正。

前 言

近来, Springer 出版了一部名为 *From Multiscale Modeling to Meso-Science — A Chemical Engineering Perspective* 的专著, 该书总结了作者及其团队在以化工为主的多个领域中, 三十年来的介尺度模型研究。基于在不同系统中所观察到的共性规律, 在该书的结尾提出了“介科学”的概念, 但未作详细的探讨。

由读者的反馈, 我们意识到, 该书有助于读者理解介尺度建模与模拟, 但在介科学方面, 由于仅限于十分初步的描述, 并未能揭示介科学的全景。此外, 在该书出版之后, 我们又进一步澄清了介科学的一些概念。因此, 有必要出版一个简本, 提炼原书中与介科学最为相关的内容, 以便为这个概念提供一个初步、但在目前认识基础上又较完整的描述。

受 Springer 的支持, 这个简本介绍了竞争中的协调原理的形成过程。首先概述了针对气-固系统中颗粒团聚行为的多尺度模型是如何构建、验证、扩展, 并最终发展成为可能描述所有介尺度现象的竞争中的协调原理, 即 EMMS (能量最小多尺度) 原理的。此外, 基于最新获得的结果, 尤其是对蛋白质折叠、湍流, 以及材料制备过程稳定性条件认识的深入, 在原书基础上, 该简本为介科学这个概念补充了更多的信息。我们希望这个简本可以帮助读者更好地理解介科学的概念。如果能够将介科学发展成一个通用的交叉学科,

将有助于我们解决当今的许多挑战性问题，这是促使我们首先撰写原书，现在又撰写本简本的驱动力。

我们诚挚感谢原书的作者，以及 EMMS 课题组的所有同事。此外尤其要感谢 Springer 对本简本出版过程给予的支持。

符 号 表

C_D	曳力系数, 无量纲
d_{cl}	聚团直径, m
d_e	涡直径, m
d_i	对象 i (大气泡、小气泡) 的直径, m
E_j	对应主导机制 j 的目标函数
f	密相的体积分率, 无量纲
f_e	涡的体积分率, 无量纲
f_i	对象 i (大气泡、小气泡) 的体积分率, 无量纲
F	外力场, m/s^2
F_i	第 i 个约束条件
H_A	单位质量 A 股颗粒的势能, J/kg
H_B	单位质量 B 股颗粒的势能, J/kg
L	距离, m
m	质量, kg
N_{surf}	单位质量流体内, 由气泡聚并与破碎所导致的能量耗散速率, W/kg
N_{st}	用于悬浮和输送单位质量颗粒的能量消耗速率, W/kg
N_{turb}	单位质量湍动液体内的能量耗散速率, W/kg
r	径向坐标, m
R	半径, m
R_m	质量比, 无量纲

R_v	随机速率与定向速率之比, 无量纲
U	表观速率, m/s
U_c	密相中气体的表观速率, m/s
U_f	稀相中气体的表观速率, m/s
U_g	表观气速, m/s
$U_{g,i}$	对象 i (大气泡、小气泡) 中的表观气速, m/s
U_l	液体的表观速率, m/s
U_p	颗粒的表观速率, m/s
U_{pc}	密相中颗粒的表观速率, m/s
U_{pf}	稀相中颗粒的表观速率, m/s
v	随机速率, m/s
V	定向速率, m/s
W_{st}	用于悬浮和输送单位体积床层内颗粒的能量消耗速率, W/m^3
W_{te}	单位体积内, 由惯性导致的能量耗散速率, W/m^3
W_v	单位体积内, 由黏性导致的能量耗散速率, W/m^3
x	状态向量
x_i	状态向量的第 i 分量
α	角度, $^\circ$
ε	局部平均空隙率, 无量纲
ε_c	密相中的空隙率, 无量纲
ε_f	稀相中的空隙率, 无量纲
μ_e	涡中流体的黏度, $Pa \cdot s$
μ_l	液体的黏度, $Pa \cdot s$
μ_{lam}	层流中流体的黏度, $Pa \cdot s$
ρ_e	涡中流体的密度, kg/m^3

ρ_g	气体密度, kg/m^3
ρ_l	液体密度, kg/m^3
ρ_{lam}	层流中流体的密度, kg/m^3
ρ_p	颗粒密度, kg/m^3
σ	表面张力, N/m

目 录

符号表

1 背景：关联微尺度与宏尺度	1
1.1 一个共性挑战	1
1.2 工程人员的机遇	2
1.3 对介尺度的关注	3
1.4 研究历程	4
1.5 本书的目的	6
2 EMMS 原理：机制之间竞争中的协调	7
2.1 结构非均匀性的重要性	7
2.2 分析非均匀结构	11
2.3 分析非均匀性的多尺度方法	12
2.4 一种变分多尺度方法：EMMS 模型	15
3 EMMS 原理的验证与应用	19
3.1 EMMS 原理的初步检验	19
3.1.1 竞争中协调的重要性	19
3.1.2 探索 EMMS 原理的普适性	22
3.2 EMMS 原理的验证	25
3.3 EMMS 原理的应用	28
4 EMMS 原理的扩展与推广	31
4.1 EMMS 原理扩展到气-液系统	31
4.2 EMMS 原理扩展到湍流	31

4.3	EMMS 原理的可能普适性	34
4.3.1	EMMS 原理的物理内涵	34
4.3.2	EMMS 原理的数学表达	34
4.4	EMMS 计算范式	37
4.4.1	EMMS 范式的架构	37
4.4.2	EMMS 范式中结构与逻辑的相似性	41
5	EMMS 原理与 VPE	42
5.1	VPE (虚拟过程工程)	42
5.2	VPE 的现状与前景	43
6	探索介科学	46
6.1	对复杂系统认识的局限	46
6.2	单元尺度与系统尺度之间的介尺度	47
6.3	介科学的范畴	49
6.4	介科学的共性原理	50
6.5	介科学的跨学科本质	51
6.6	系统中的层次与尺度	52
6.7	介科学的初步定义	55
7	介科学展望	56
	参考文献	64
	索引	72

1 背景：关联微尺度与宏尺度

1.1 一个共性挑战

20 世纪后半叶以来，对于复杂现象的微（单元）尺度和宏（系统）尺度行为的认识发展很快，由此，人们期望能够找到各种挑战性问题的完整解答。然而，人们意识到，将系统的行为与其单元的信息相关联仍然十分困难，比如，生物体特征与基因信息，蛋白质特性与氨基酸组成，湍流行为与分子间相互作用，超导现象与单个电子的行为。也就是说，当前还原论还不能与整体论相衔接。那么，在系统尺度与单元尺度之间还缺失了什么？显然，如何连接这两个认识相对充分的领域，填补其间的未知鸿沟是当代科学与技术面临的挑战。也许可以认为，这种未知鸿沟的存在是由于忽视了一种在各种不同介尺度上都起作用的共性控制原理。而且，对介尺度一词本身目前仍未有充分的理解。正是上述几点促使我们撰写这本简本，以对介科学的概念作一次虽仍初步但相对全面的介绍。

在工程实践中，即便掌握了一个特定系统中所有的单元细节，仍难以对系统提出相对于能源、资源和环境等方面的最优方案。大量单元的群体行为是支配系统整体性能的关键所在，但要认识、描述和预测这种群体行为十分困难。

过程工程中的情形也是如此。比如，难以依据原子、分子的性质来设计材料，也不能由对单颗粒行为的认识来预测反应器的性能。

正因如此,化工过程从实验室规模到工业规模的放大始终是一个挑战,说明对于材料层次和反应器层次中在单元尺度与系统尺度之间的介尺度的认识仍十分有限。

故而,各领域的研究人员都在积极寻求可以关联微尺度与宏尺度的可能的理论与方法,即认识大量单元的群体行为,比如复杂性科学中的诸多探索^[1]。然而,这方面的进展并不理想。人们没有认识到不同系统之间的相似性,不同的团队从不同的角度考察尺度之间的差异,由此衍生了各式各样的概念,包括复杂性、非线性、自组装、自组织、涌现、耗散结构、混沌、间歇、有序/无序等等。虽然对于达到关联微尺度与宏尺度这个共同目标的兴趣日益增长,但对于什么才是探索该问题的最佳方法仍存在困惑。有理由认为,虽然难以回答复杂系统的相关研究为何进展缓慢,但忽视不同介尺度上存在的共性控制原理可能是原因之一。

1.2 工程人员的机遇

由于目前还无力填补微尺度与宏尺度之间的鸿沟,于是很自然会问:至今还忽视了什么?什么才是考察这类问题的正确角度?是否存在关联微尺度信息与宏尺度行为的共性控制原理?现有的诸多相关概念之间是否存在相联系的共性?这些问题是各个领域都面对的共性问题。但由于所考察系统的多样性和复杂性,要回答这些问题,最好通过考察各种不同的具体系统,进而提炼其中的共性规律。这也给工程技术人员提供了一个可以为一门综合的交叉学科作贡献的机会。

这不同于传统科学,传统科学往往针对特定领域设立,而后应用于其他领域。比如,传递现象理论始于化工领域,但已应用于能

源、资源、环境，乃至生物技术等诸多领域。再比如，计算科学也是作为一门具体科学创建的，但其应用已几乎遍及科学技术的各个领域。

工程技术人员解决工程问题时，往往习惯于依赖基础科学中的相关知识。比如，化学工程技术人员一般基于化学、物理、生物或数学的相关知识，为能源、材料等行业开发新的化学或生物技术、工艺与设备。不过，面对新的挑战，工程技术人员已意识到现有的知识并不足以解决越来越多的新出现的工程问题，而且发现现有知识的缺失多出现在单元与系统之间的尺度上。由此可以推测，在现有知识的局限性背后可能存在着一个共同的原理，正是该共性原理激发工程技术人员不断探索新规律，更新知识库。本简本及之前的原书所阐述的正是化学工程技术人员的这类研究，即通过对不同具体问题的研究来揭示其共性规律。

1.3 对介尺度的关注

“Meso”源自古希腊的 *mésos*，意思是“中间”，用以描述介于大、小之间的尺度，即介于中间的现象。与“介观”所常指的 $100 \sim 1000 \text{ nm}$ ^[2] 这个量子力学与经典力学交界的特定尺寸范围不同，这里探讨的“介尺度”是个相对的概念，指的是任何介于单元尺度与系统尺度之间的尺度范围，并不局限于某个具体的尺寸范围，而是如后面的图 6.3 所总结的那样，可以从基本粒子到宇宙这个广阔尺度内的任一尺度段^[3]。因此，可以说，“介尺度”概念与现有的所有科学分支和技术领域都有关系。需要强调的是，只有在对系统进行比较细致的分解的基础上，才有可能准确地考察其中的介尺度问题，否则，两个甚至多个介尺度问题可能混在一起，难以找出其中的支

配原理。介尺度现象总是与大量单元的群体行为相关，往往呈现出空间上的非均匀性和时间上的动态变化。

我们在无意之间介入了对介尺度问题的研究。20 世纪 80 年代，出于对化学工程中传质和反应过程进行调控的考虑，我们考察气-固流态化系统中的颗粒团聚行为，而这正是一个介于单颗粒（微）尺度与整个反应器系统（宏）尺度之间的介尺度上的行为。基于该研究我们建立了 EMMS（能量最小多尺度）模型。EMMS 模型的基本原理是不同主导机制在竞争中的协调，后来进一步表达为一种多目标变分 (MOV) 问题。该模型向管湍流及其他复杂系统的扩展激起了我们继续探讨 EMMS 原理的普适性的兴趣。我们逐渐意识到有可能找到一个统一的原理，并建立一种通用的表达来关联微尺度与宏尺度，也就是，有可能建立一门新的交叉科学——介科学^[3,4]。

在此，将阐释我们如何一步步走近介科学的概念，以及我们对介科学的初步理解。我们希望这可以触发不同领域的研究人员对介科学的兴趣。

1.4 研究历程

图 1.1 总结了三十年来中国科学院过程工程研究所 (IPE, CAS) 对各种复杂系统的介尺度模型研究，从反应器内颗粒团聚这个特例开始，逐步提出具有普遍意义的介科学的概念。起源于对颗粒团聚行为的研究，我们通过分析主导机制在竞争中的协调，建立了 EMMS 模型^[5,6] 来描述气-固流态化系统。随后，我们采用拟颗粒方法验证了 EMMS 模型^[7-10]，并将该模型扩展到其他复杂系统^[11,12]，同时应用于多种工业实践。逐渐地，我们建立起了 EMMS 原理，其可简述为“主导机制在竞争中的协调”。该原理表明，在从基本粒子到