

过程工程量化的科学途径 ——多尺度法

李静海 郭慕孙

(中国科学院化工冶金研究所, 北京 100080)

摘要 时空多尺度特征是过程工程中所有复杂现象的共同特征, 实现其量化和系统集成, 增强我国自主设计和开发过程工业的能力, 是发展我国过程工业的关键。以“单元操作”和“传递过程”(被称为化学工程科学的第一和第二里程)为标志的传统方法已不能满足这一需求。研究流动、传递、分相和反应多尺度(范围小至分子, 大至河流、大气)行为和同一尺度下这些现象共存的规律, 通过分尺度研究和多尺度综合, 实现复杂现象的量化, 是当前过程工业定量化的趋势。

关键词 多尺度 非线性 计算机模拟 复杂系统 过程工程

1 过程工程定量化的重要意义

过程工程是通过化学或物理加工进行物质转化的所有过程的总称, 比如: 能源、资源、环境、材料、医药、建材、冶金、化肥、食品等都与过程工程密切相关, 因此它在国民经济中起着举足轻重的作用。然而, 我国过程工程存在如下几方面问题:

(1) 已有设备和过程能耗高、污染重、浪费资源。我国各行业能耗都比世界平均水平高很多, 比如: 炼钢和生产水泥的能耗是发达国家的2倍, 生产玻璃的能耗竟高10倍; 水和空气污染已严重危害人民健康。

(2) 新设备和新过程的设计和放大能力差。很多工艺过程依靠经验逐级放大, 周期长、费用高、失败的可能性很大, 有的过程开发到中试阶段后, 仍难以实现工业化, 最后不得不依靠引进, 既耗费巨资又无自主知识产权。

(3) 开发高新技术产品特别困难。开发高精性能产品如纳米材料、记录介质、表面涂层等, 对工艺过程及其调控要求苛刻, 由于无法对过程量化, 生产的产品性能差、成本高、难以满足高技术发展的需求。

这些问题已成为国民经济发展的“瓶颈”问题。随着对能源、环境和资源需求的不断增长和高技术的进一步发展, 这些问题必将更加突出。因此, 寻求新的途径、提高过程工业量化水平是国民经济面临的重要课题。多尺度结构是过程工业中复杂现象的共同本质, 过程工业量

化中的尺度效应非常突出,表现在如下3个方面:任一微尺度的反应只有大规模进行才能工业化;微观反应条件的改变只能通过设备尺度的调控才能实现;设备尺度的改变往往导致过程的突变(“放大效应”)。目前普遍使用的单一尺度的平均方法,难以对如此复杂的尺度效应进行量化。此外,在解决国民经济中的瓶颈问题时,多尺度法涉及的科学内涵属当代数学、物理、非线性科学等多种学科交叉的前沿,可望启迪未来。

2 现状和发展趋势

工艺设备的放大和优化操作是过程工业面临的困难问题。用理论预测方法取代传统的经验式逐级放大是这一领域梦寐以求的目标,然而,这方面的突破并不明显。目前使用的基于单一尺度的平均方法由于无法反应过程的内在机理而必须引用诸多可调的经验参数,预测性很差,无法解决定量放大和调控的问题。为此,近年来工程界和学术界开始呼吁寻求继只知输入和输出的“单元操作”和略知设备内部状态的“传递过程”(被称为第一和第二里程)后过程工程科学的第三里程^[1,2]。

对设备内部所有的微观细节进行量化既不可能也没必要,而多尺度结构作为过程工程中众多现象突出的特征,已逐步引起关注^[1,3,4],我国也已有成功应用多尺度法预测气固流型的例子^[3]。过程工程中复杂现象大多具有非线性非平衡特征。尽管无法找到非线性非平衡系统的普适的稳定性判据^[5],但对于很多过程还是可以通过尺度和过程分解分别找到各自的稳定性条件^[6,7]。这些都预示着用多尺度方法对过程工业进行量化的可行性和发展势头。

计算机模拟在过程工业中的应用已有很长的历史,但真正能实现过程定量预测的例子还极少见,原因之一是现有模拟主要基于单一尺度的平均方法。随着计算机技术的发展,分子模拟近年来发展迅速^[8],基于单一颗粒尺度的全流场模拟也取得进展^[9],可以预料,计算机仿真技术将在过程工业量化方面得到广泛应用。

复杂过程的多尺度结构业已得到广泛关注,与此同时,各学科的最新进展也为开展多尺度研究奠定了基础。我国在这方面已开展了具体的工作,如能好好组织,可望有效地提高我国过程工业定量设计、放大和调控的水平,促进过程工业的发展。

3 多尺度法的基本思路

过程工程中的所有现象可以归纳为4种过程:流动、传递、分相和反应;6种尺度:分子、纳微米、单元(颗粒、液滴、气泡)、聚团、设备、工厂;2种变化:规则、非规则。表1为不同尺度下各种过程的举例说明。只有充分考虑和了解不同尺度的过程,才能在设备规模下实现所要求的物理或化学变化。多尺度法可归纳为:(1)将总过程分解为若干不同尺度的子过程;(2)在不同尺度下对各子过程进行研究;(3)进一步研究不同子过程之间的相互联系;(4)通过物理化学过程分析归纳出系统产生多尺度结构的控制机理;(5)综合这些不同子过程的研究,来解决总过程的问题。

实施这些步骤的关键难点为:

(1) 进行尺度分解的原则, 选择尺度必须具有代表性, 可以表达过程的结构特征; (2) 不同尺度间的相互联系; (3) 进行多过程和多尺度综合的方法和规则。

表 1 多尺度法的尺度/过程二维结构表

尺度 过程	分子	纳微米	单元(颗粒 液滴、气泡)	聚团	设备	工厂
反应	微观反应	微孔微隙 中的反应	单颗粒反应 动力学	非均匀结构 中的反应	提高转化率 和选择性	
分相	分子碰撞、 涨落、成核	团、簇	气泡、液滴 颗粒的形成	团聚和合并 过程	多态行为 和突变	产品分离
传递	分子碰撞	微孔微隙中 的物质交换	单元与周围 物质的交换	非均匀结构 中的传递	返混、扩 散、分级	热、质转移
流动		小尺度流动	绕流	局部非均匀 结构	径向和轴向 非均匀分布	物料传递

对于不同的对象和过程, 具体处理方法有别, 但其共性的基本思路如图 1 所示。

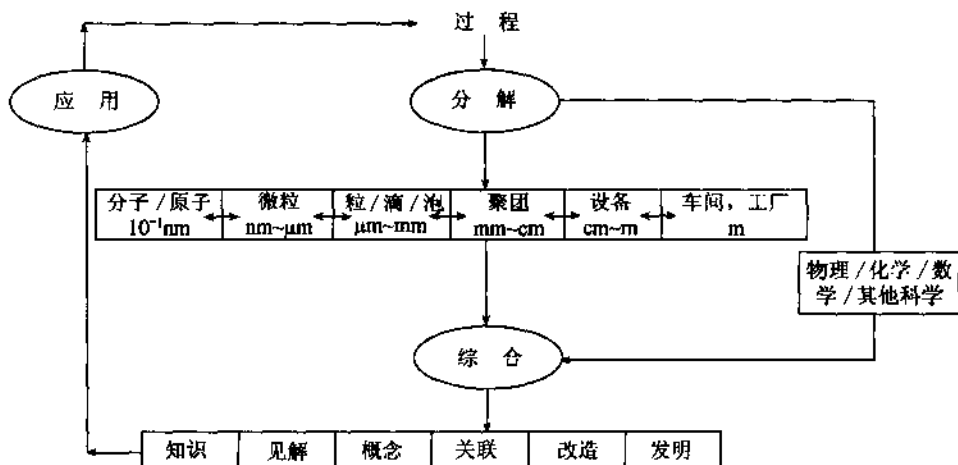


图 1 多尺度法基本思路

可简述如下:

(1) 分尺度简化。多尺度结构中涉及各种各样的复杂的过程, 同一尺度下会有多种过程的耦合, 不同尺度下也往往会有不同过程发生。然而, 每一分尺度的结构及其内部发生的过程都要比原始结构和总过程简单, 复杂系统可以看作由不同尺度的相对简单的结构复合而成。因此, 首先对总系统进行分尺度研究, 可使认识过程简化, 并部分实现不同过程的解耦。比如: 聚式流态化中的稀、密两相结构是一种典型的多尺度有序结构, 在稀相和密相中分别存在单颗粒尺度(微尺度)的颗粒流体相互作用, 并且两相中这种作用截然不同——稀相中的微尺度作用由流体控制, 而密相中的微尺度作用由颗粒控制。两相之间存在颗粒聚团尺度(介尺度)的相互作用, 即稀相与聚团的作用, 这种作用受两相之间的相互协调所控制, 设备尺度(宏尺度)作用则发生在两相结构与边界之间。进行三尺度分解后, 原来高度非均匀的结构被分解为可认为均匀的稀相、密相和相互作用相, 分别描述十分简单。

(2) 子过程分析. 复杂系统的另一特征是多种过程耦合, 直接对总过程进行分析, 无法认识其内在机理. 只有先认识各子过程, 才能归纳出总过程的规律. 分尺度分析为认识子过程提供了方便, 往往在每一尺度上和不同尺度的耦联中都伴随一特征子过程. 因此, 分尺度简化是子过程分析的基础. 比如: 流态化中的颗粒尺度作用主要以悬浮和输送过程为主, 聚团尺度的作用则导致大量的能量耗散和无规则的运动.

(3) 多尺度综合. 在上述两个步骤的基础上, 进一步分析不同尺度下的各种子过程的相互量化关系, 并与已知条件关联, 构成描述复杂系统的综合模型. 多尺度综合是最困难和关键的一步, 必须澄清不同尺度相互作用和耦合的原则和条件. 比如: 气固流态化中多尺度作用的耦合原则是单位质量颗粒耗散能量最大或悬浮输送能耗最小. 一方面微尺度作用中的悬浮和输送过程要求悬浮输送能耗最小, 另一方面为维持这一多尺度结构, 必然伴有耗散能量最大. 一般而言, 多尺度系统都有多值性问题, 因此综合的关键是要找到控制系统的稳定性条件.

4 多尺度法举例

为说明上述多尺度法的可行性和有效性, 下面简述几个例子:

(1) 能量最小多尺度 (EMMS) 方法^[3] (如图 2 所示). EMMS 通过对颗粒尺度、聚团尺度的结构尺度和设备尺度下颗粒流体相互作用的分析, 可以建立 6 个质量和动量守恒方程, 实现了能耗和非均匀结构定量表达, 并通过对物理过程分析找到了稳定性条件为悬浮输送能耗最小. 此方法已形成量化设计软件用于工业设备的计算, 其特点是无需可调参数, 可完全理论预测, 结果与工业数据吻合.

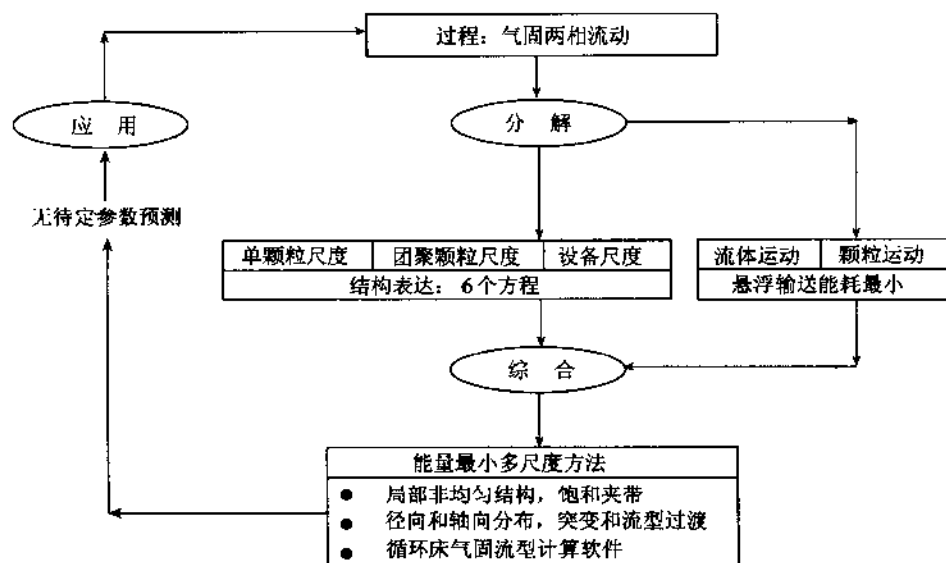


图 2 EMMS 方法的研究思想

(2) 解耦循环床燃烧^[10]. 通过三尺度调控使 NO_x 排放最低, 即: 设备尺度下通过解耦

燃烧(即干馏和半焦燃烧分解),创造氧化脱硫和还原脱硝的最佳分区条件;结构尺度下利用流态化稀密两相交替出现的属性,使聚团内部为还原气氛,外部为氧化气氛,进一步促进脱硫脱硝过程^[11],从而使分子尺度下由干馏产生的还原性气体还原 NO_x 的反应在有限空间内最大限度地进行。

(3) 超微颗粒流态化^[12]。 纳米尺度的单颗粒聚集成小聚团,小聚团在气流作用下又形成大聚团,大小聚团同时流态化。

(4) 湍流流动的大涡模拟^[13]。 将湍流运动分解成大尺度运动和小尺度运动两部分,大尺度量可通过数值求解微分方程直接计算,小尺度运动则在运动方程中表现为类似子Reynold应力的应力项。在这一有序结构中,大尺度涡表现出有序运动,而小尺度涡的运动则具有随机性,很显然,不考虑这种多尺度行为,无法揭示其内在机理。

5 对多尺度法的展望

(1) 多尺度是过程工程的共同特征。 多尺度是所有非线性非平衡系统的共同特征,这一特征来源于系统内由于非线性效应而发生的自组织及其局部发生的分岔现象。因此,抓住多尺度特征就抓住了问题的实质,才易于发现问题的普遍规律。

(2) 多尺度分析是量化过程的有效途径。 多尺度特征不仅是一种结构特征,更体现了多尺度结构中过程的多样化和复杂性,不同过程发生在不同尺度及尺度耦合之中。因此只有分尺度的研究才能认识这些问题。

(3) 多尺度分析必须借助于非线性科学和计算机仿真。 多尺度结构的本质是非线性非平衡,应用已有的非线性科学知识,注意到不同系统的特殊性,并借助目前发展很快的计算机仿真方法,将有助于认识过程内在机理和微观行为。

(4) 多尺度法的最终目标应是设计方法和软件。 我国过程工业落后和基础研究成果难以应用的根本原因是研究成果仅停留在发表文章的阶段,内容也比较零散,无系统性。事实上,为扭转我国过程工业的落后局面,这一领域的科研工作必须有很强的导向性,需要统一组织,周密规划,以实现过程量化为核心,建立设计方法和软件为目标。

6 结语

综上所述,多尺度方法是实现过程工程定量化的有效方法。与传统的平均方法相比,它可以触及到复杂过程的内在规律,但又不增加太多的复杂性,适合于工程应用。实施多尺度法的关键在于多尺度之间的关联,这必然涉及到过程的非线性非平衡机理,需要非线性科学、计算机模拟和其他交叉学科的知识及先进的测试手段。因此联合多学科的力量,重视过程工程中非线性问题的研究,不仅是实现过程工程定量化的关键,而且能够促进非线性科学的发展。应引起工程界和学术界的关注。

此外,离散化方法随计算机技术发展也越来越得到重视。离散化方法要求巨大的计算量,但它比多尺度方法的优越性在于当离散单元足够小时,可以不再考虑结构的稳定性。当前,比较现实的策略是用多尺度方法描述宏观结构,而用离散化方法研究微观细节。

参 考 文 献

- 1 Villermaux J. New horizons in chemical engineering. In: Proceedings of the 5th World Congress of Chemical Engineering, San Diego: AIChE, 1996. 16
- 2 Wei J. New horizons for reaction engineering. Chem Eng Sci, 1990, 45(8): 1947
- 3 Li J H, Mooson Kwauk M S. Particle-Fluid Two-Phase Flow——The Energy-Minimization Multi-Scale Method. Beijing: Metallurgical Press, 1994
- 4 Lerou J J, Ka M Ng. Chemical reaction engineering, a multi-scale approach to a multi-objective task. Chem Eng Sci, 1996, 51: 1595
- 5 Gage D H, Schiffer M, Kline S J, et al. The non-existence of a general thermodynamic variational principle. In: Donnelly R J, Herman R, Prigogine I, eds. Non-Equilibrium Thermodynamics, Variational Techniques and Stability. Chicago: the University of Chicago Press, 1996. 283
- 6 Sieniutycz, S, Salamon P. Nonequilibrium Theory and Extremum Principles. New York: Taylor & Francis, 1990
- 7 Xu G, Li J. Analytical solution of the energy-minimization multi-scale model for gas-solid flow. Chem Eng Sci, 1998, 53(7): 1349
- 8 Frenkel D, Smit B. Understanding Molecular Simulation. San Diego: Academic Press, 1996
- 9 Tsuji Y, Kawaguchi T, Tanaka T. Discrete particle simulation of two dimensional fluidized beds. Powder Technology, 1993, 77(1): 79
- 10 李静海, 郭慕孙, 白蕴茹, 等. 解耦循环流化床燃烧系统及其脱硫与脱硝方法. 97112562, 7, 1997
- 11 Makanrychev S V, Cen K F, Luo Z Y, et al. High-temperature sulphur removal under fluidized bed combustion——a chemical interpretation. Chem Eng Sci, 1995, 50: 1401
- 12 Wang Z L, Kwauk M S, Li H Z. Fluidization of fine particles. Chem Eng Sci, 1998, 53: 377
- 13 陈景仁(美). 清流模型及有限元分析法. 戴国才等译. 上海: 上海交通大学出版社, 1989