

颗粒流体系统的多尺度结构及其多元分解方法

李静海 葛蔚 袁捷

(中国科学院化工冶金研究所, 北京 100080)

[摘要] 本文讨论颗粒流体系统中颗粒与流体之间的非线性非平衡相互作用及其导致的耗散结构的多尺度和多过程特征, 介绍为量化这一结构而提出的多元分解方法及近年来这方面取得的进展, 最后以作者个人的观点讨论这一领域的发展趋势。

[关键词] 非线性, 耗散结构, 颗粒流体系统



1 学科背景、存在问题、研究焦点

自然界中气、液态物质统称为流体, 固态物质在物理和化学加工过程中通常都以颗粒的形态存在, 并在流体介质中进行。因此, 颗粒流体流动是自然界最普遍的现象之一, 广泛应用于能源、资源、环境、材料、化工、医药等国民经济支柱产业的生产过程中。另一方面, 颗粒流体系统作为多相流动的一个重要分支, 是多相流体力学的前沿领域之一。

然而, 颗粒流体两相流仍是一个很不成熟的学科, 已有数据和模型都基于经验关联, 完全的理论量化还不可能, 很多现象的机理仍属未知。因此, 工业过程中颗粒流体系统的设计只能靠经验, 过程放大周期长、费用高, 中试和工业化过程往往很难。已有的颗粒多相反应器也普遍存在能耗高、污染严重、浪费资源等问题。尤其是我国自主设计和开发这类反应器的能力很弱, 严重制约我国经济的发展。因此, 加强这一领域的基础研究, 逐步实现反应器设计和放大的定量化, 形成自主设计和开发的能力, 不仅能解决国民经济中的瓶颈问题, 而且是多相流体力学的前沿课题。颗粒流体系统大多属非线性非平衡的耗散结构^[1], 对其内在机理的认识无疑会对非线性科学的发展起到促进作用。

李静海, 男, 1956 年 10 月生于山西静乐。现任中国科学院化工冶金研究所研究员、副所长、学术委员会副主任。1982 年毕业于哈尔滨工业大学动力工程系, 1984 年获该校硕士学位, 1987 年在中国科学院化工冶金研究所获得博士学位后, 赴美国纽约市大学化工系和瑞士联邦理工学院机械系做博士后研究, 1990 年回国后一直在中国科学院化工冶金研究所多相反应开放实验室, 从事颗粒多相反应器定量化的基础研究和新型反应器开发工作。目前还兼任国际循环流化床会议顾问委员会委员和召集人, 中国颗粒学会常务理事兼秘书长, 中国化工学会理事, 化学工程专业委员会副主任, 四川联合大学兼职教授和《中国科学》等多个期刊的编委。1989 年获国家自然科学奖二等奖和中国科学院自然科学奖一等奖(第五获奖人), 1993 年获中国科学院自然科学奖一等奖(第一获奖人), 1995 年获国家自然科学奖三等奖(第一获奖人), 1996 年获香港求是科技基金会“杰出青年学者奖”和第三届中国青年科学家奖化学奖。发表英文专著 1 本, 学术论文 80 余篇, 取得专利 10 项。

本质上讲, 量化颗粒流体系统的难点在于其内部颗粒与流体之间相互作用的非线性特征。从内容上讲, 则在于其内部的非均匀结构及伴随的时空动态行为。事实上, 正是非线性非平衡的相互作用导致了复杂的流动结构和变化。由于非线性非平衡系统并无普适的单一判据, 因而这类系统除具有与其它非线性系统共有的规律外, 其固有的特殊性往往控制着系统的行为, 因此应是研究的重点, 这就给研究工作带来了困难。目前, 这一领域的研究工作存在如下问题:

1.1 物理假设与现象的差异

多数颗粒流体系统呈现多尺度的非均匀结构并伴有复杂的动态变化。也就是说, 非线性非平衡是这类系统的控制机理。然而, 多数模型都建立在单一尺度的平均参数和近平衡假设的基础上, 这种假设与现象的不同妨碍了对过程机理的认识。

1.2 强调已有理论的应用, 而忽视了特殊问题的研究

颗粒流体系统具有与其他流动系统类似的特征, 比如, 质量和动量守恒, 它也具有其它非线性非平衡系统共性的特点, 诸如: 混沌和分形等等, 这些普遍的规律当然地引起了广泛关注。但遗憾的是, 现有研究并未重视颗粒流体系统中的特殊问题, 比如, 对颗粒流体系统行为起控制作用的过程是颗粒和流体两种介质之间的相互作用, 所有的复杂现象都来源于这一问题。研究表明, 非均匀有序耗散结构的根源是颗粒与流体之间在实现各自运动趋势过程中的相互协调^[2], 但这一关键问题并未引起重视。比如, 与这一作用有关的曳力系数, 常常使用只适用均匀系统的经验关联, 而均匀系统中颗粒流体的相互作用机制与非均匀系统截然不同。在对控制机理不了解的情况下, 认识和量化系统是很难的。

1.3 过分简化的模型和数理方法的限制

工程中的颗粒流体系统的颗粒均具有一定粒度分布和非规则形状, 而由于分析方法的限制, 模型中只能考虑单一的平均直径和规则的形状, 因而很难反映颗粒与流体之间真实的相互作用。此外, 现有的数理方法并不能完全描述颗粒流体系统中复杂的相互作用, 因而颗粒流体系统研究的突破在一定程度上还依赖于数学和物理方面的新进展, 包括一些微观动态测量技术的建立。比如, 非线性非平衡系统并无普适的稳定性判据, 因此, 现有理论无法描述系统的稳定性。又如, 颗粒流体系统中出现的壅塞现象属二级分支现象, 现有理论还无法量化其临界条件, 等等。

根据颗粒流体系统的特征及当前存在的问题, 可以认为, 这一领域的研究重点应集中在以下几个方面:

(1) 颗粒流体之间的非线性非平衡相互作用: 在多数颗粒流体系统中, 大部分能量以热能的方式耗散于不可逆过程, 正是这些能量耗散维持了系统内有序的耗散结构, 为什么两种独立的介质相互作用, 会导致有序结构? 在这一结构中, 颗粒流体的相互作用应满足什么条件? 这一结构的破坏又发生在何种临界条件下? 如何描述这种结构及其动态变化(包括测量方法)? 这些问题可以认为是量化颗粒流体系统的关键。

(2) 多尺度时空动态行为及其对传递和反应过程的影响: 非均匀的有序结构导致颗粒和流体之间多尺度的相互作用, 尽管目前很多研究还使用单一尺度的平均参数, 但这样的简化必然掩盖了过程的内在机理, 尤其是无法描述过程中的传递和反应。比如静态的非均匀结构与动态非均匀结构之间传递性能差别很大^[3], 这一差别归因于结构的动态变化; 又如, 等量

颗粒和气体在同一体积内以均匀结构存在和以非均匀结构存在两种情况下传递性能的差别^[4]则来源于结构的差异。因此,建立描述非均匀结构中传递过程的模型方法是这一领域的另一重要内容。

(3) 利用其它学科的进展创建新的方法:非线性科学、计算机技术以及数学、物理和力学等领域的最新进展,为颗粒流体系统的研究开辟了新的途径。然而,应避免对其它领域一些新方法和新理论的简单的套用。

2 近年来的工作及进展

根据以上分析,近几年,我们课题组在这一领域的科研工作主要致力于:颗粒流体作用过程中的相互协调及由此而产生的耗散结构;量化这一耗散结构的多元分解方法;多尺度时空动态行为的量化表达及其计算机仿真,并以此建立工业设备设计方法和开发相应的软件包。主要进展及内容归纳如下:

2.1 颗粒流体系统中的耗散结构

研究表明,气固两相系统在一定条件下呈现典型的耗散结构^[5],这种结构产生的根本原因是颗粒流体两种介质在相互不能控制对方时的相互协调和对抗运动。此种条件下,系统既不能完全满足颗粒的运动趋势,也不能完全满足流体的运动趋势,两种趋势只能相互调协,在尽可能满足对方的情况下,最大限度地实现自身的趋势,因而系统的稳定性条件表达为两种趋势互为条件极值,即:

$$(\text{流体运动趋势 } W_{st} = \min) | (\text{颗粒运动趋势 } N_{st} = \min)$$

一旦一方可以完全控制另一方,系统内将出现分支现象,非均匀有序的耗散结构被均匀无序的结构取代,此时,系统的稳定性条件与控制系统的介质的运动趋势一致。这一结论已通过两种介质的计算机仿真所证实^[5]。

2.2 量化耗散结构的多元分解方法

颗粒流体系统中耗散结构的表观特征是多尺度行为,而内在特征是多种过程的共存与耦合。为此,本课题组提出了多元分解的概念^[5,6],即:将总过程分解为可逆和不可逆、结构分解为3种尺度、过程分解为极值和无规则。这一概念的应用产生了如下效果:

(1) 可将复杂的过程表达为1个周期过程与4个随机过程的非线性耦合,可望实现动态结构的量化表达。

(2) 非均匀结构经多尺度分解后成为3个均匀的子结构,使适用于均匀结构的计算方法可以应用于非均匀结构。

(3) 可逆过程和非可逆过程的区分使研究者可以先了解可逆过程的变化规律,从而为寻找系统的稳定性条件提供了方便。

2.3 模拟颗粒流体系统的“拟颗粒”方法

模拟颗粒流体系统可有两种极端方法,其一是研究颗粒与所有流体分子之间的作用,这一方法由于计算机运算能力的限制,目前很难实现;另一种极端是将颗粒和流体均处理为连续介质,这一处理必须保证系统满足近平衡的假设,然而,这一假设有时很难满足。为此,我们提出介于两者之间的“拟颗粒”方法,即将流体处理为大量代表许多分子的“拟颗粒”,这样既减少了计算量,又绕开了连续介质的限制,用这一方法已能模拟一些典型的现象^[7]。

进一步的发展正在进行之中。

2.4 传递过程的多尺度特征

现有传质研究都限于单一尺度的总体静态平均,未考虑结构变化和动态行为的影响,为此提出将整个传质过程分解为:气体与单颗粒、气体与单个颗粒聚团、气体与静态聚团群以及聚团群的动态变化4个分过程^[3]。通过对各子过程的研究,积累了传质数据,为建立模型奠定了基础。进一步的工作仍在进行之中。

2.5 对系统进行多尺度调控

任何一个化学反应过程在设备中实施的总体效果都与过程不同尺度的行为相关。因此,对过程进行多尺度的调控必能优化整个过程。根据这一思想,课题组提出通过不同尺度的调控来抑制燃煤过程中的排烟和 NO_x 的排放。即:微尺度下,将反应过程分解为干馏和半焦燃烧,非均匀的两相结构尺度下,稀密两相交替,本身就创造局部还原和氧化交替的环境^[8]。在设备尺度下,通过对反应产物的导向,使干馏产物中的还原性气体与半焦燃烧生成的 NO_x 反应,脱除 NO_x ^[9]。这一原理,为简便地解决民用燃煤设备中烟尘和 NO_x 的污染问题提供了有效的途径。

2.6 循环流化床流场计算方法及软件包

在多年研究工作积累的基础上,最近课题组又建立了气固返混模型,并求得了能量最小多尺度作用模型的解析解^[10],形成了计算循环流化床内气固流型的完整方法和软件包^[11]。要求输入的参数为:气体速度、颗粒流率、物性参数、总的存料量及设备结构尺寸。预测参数包括:饱和夹带量、轴向和径向颗粒浓度分布、气固返混流率等。该方法与已有的方法相比,优点在于:无需任何可控参数,因此预测能力强;可以理论预测饱和夹带量,经与工业数据比较,精度较高。

3 展望

随着社会对能源、资源和环境要求的不断增长和可持续发展的迫切需求,颗粒流体系统作为过程工业中一种主要的反应器形式,必将得到越来越广泛的应用。为加速过程工业的发展,满足节能、高效、无污染的要求,颗粒多相反应器的量化设计和放大已成为学术界和工程界追求的目标。另一方面,由于颗粒流体系统是一种典型的非线性非平衡体系,对其深入的理解必能促进非线性科学、力学、物理等基础学科的发展,因此这方面的科研工作要注意以下几方面的趋势:

3.1 与非线性科学相互促进

非线性科学及其它相关学科的发展必将给颗粒流体两相系统的研究提供更多的机遇,但是应当防止出现对一些非线性分析方法的简单套用,而应重视在其理论和概念的启发下,揭示一些复杂现象的机理。另一方面,由于颗粒流体系统中存在很多典型的复杂现象(诸如:多级分支、自组织、混沌等),对这些现象的认识必将有助于丰富非线性科学的内容。

3.2 计算机模拟大有可为

计算机运算能力的快速提高,为颗粒流体系统的模拟提供了有力的手段,特别是为大规模的离散化模拟提供了可能,随着模拟单元的缩小,模拟结果将更接近于实际,也有利于微观行为研究。这方面的工作要特别注意机理性物理模型的建立,尤其是要尽可能取消可调参

数,防止单纯重视计算方法的倾向。在建立合理的物理模型的前提下,计算机模拟可望成为过程设计和放大的有效辅助手段。

3.3 多尺度方法将得到重视

由于多数颗粒流体系统中会出现有序的耗散结构,所以颗粒成群运动在难以跟踪每一颗粒的情况下,进行多尺度分析,区分颗粒在稀相和密相中的运动以及稀、密两相之间的相互作用及整个结构的动态变化,无疑抓住了过程的主导行为,是一种有效的接近实际的简化方法。当然,在分尺度研究后,如何进行多尺度综合,将是建立多尺度方法的关键。

3.4 研究结果的智能化和集成化

颗粒流体两相流是一门工程性很强的科学,单一零散的文章尽管能揭示某一现象的机理和规律,但如不进行加工和升华则很难得到应用。因此,这一领域的科研输出一定要强调智能化和集成化,使科研结果由机理性的理论上升为实用的计算方法和软件。这一点在当今知识化的时代里尤为重要,然而,却是当前该领域的一个薄弱环节。

3.5 综合和交叉已成必然

颗粒流体系统应用于诸多领域,但长久以来,这方面的研究工作在不同领域分别进行,致使同一研究内容在不同领域严重重复。比如同一问题在不同领域可有不同的术语;在某一领域已成熟的方法在另一领域得不到应用。因此,综合和交叉已成必然的趋势。综合是指用新的思路统一组织不同领域中共性问题的研究;交叉是指应用非线性科学、计算机技术、力学和物理等领域最新进展,并针对颗粒流体系统的特点,打破学科领域的界线和长久无进展的传统方法,以问题为主导布置和组织科研项目。

可以预料,在未来的几十年中,颗粒流体系统的研究由于工程方面的需求和其它领域的促进,必将有飞速的发展,并逐步达到定量设计和放大的水平。

参 考 文 献

- [1] Jinghai Li, Guihua Qian and Lixiong Wen (1996), Gas-solid fluidisation—a typical dissipative structure, *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 51, P. 667—669.
- [2] Jinghai Li and Mooson Kwauk (1994), Particle-Fluid Two-Phase Flow—The Energy-Minimization Multi-Scale Method, Metallurgical Industry Press, Beijing.
- [3] Jie Li, Xiaoping Zhang, Jia Zhu and Jinghai Li (1998), Effects of cluster behavior on gas-solid mass transfer in circulating fluidized beds, in *Proceedings of the Ninth Engineering Foundation Conference on Fluidization*, L.S. Fan and T. Knoelton (eds), May 17–22, Durango, P. 405—412.
- [4] Jinghai Li, Lixiong Wen, Wei Ge, Heping Cui, Jinqiang Ren and Guihua Qian (1996), Multi-scale behavior and multiple resolution of gas/solid flow in circulating fluidized beds, *Preprints of the Fifth International Conference on Circulating Fluidized Beds*, May 28 to June 1, Beijing.
- [5] Jinghai Li, Lixiong Wen, Heping Cui and Jinqiang Ren (1998), Dissipative structure in concurrent-up gas-solid two-phase flow, *Chem. Eng. Sci.*, in press.
- [6] Jinghai Li, Lixiong Wen, Guihua Qian, Mooson Kwauk, Jaap Schouten and Cor. M. van den Bleek (1996), Structure heterogeneity, regime multiplicity and nonlinear behavior in particle-fluid systems, *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 51, P. 2693—2698.
- [7] 葛蔚, 李静海 (1997), 聚式流态化向散式流态化过渡的离散粒子模拟, *科学通报*, 42 卷, 第 2081—2083 页.

(下转 53 页)