

颗粒流体系统的非线性行为及其计算机仿真*

李静海 葛蔚 郭友良 陈爱华

(中国科学院化工冶金研究所, 北京 100080)

关键词 非线性 颗粒流体系统 分解 计算机仿真 分支现象

1 学科概述

1.1 定义和分类

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形态存在, 并在流体介质中进行. 因此颗粒流体系统是自然界中极为普遍的现象. 颗粒流体两相流是研究颗粒流体系统中颗粒与流体之间相互作用规律的科学, 尽管其研究对象普遍存在, 但却是一个很不成熟的学科.

颗粒流体两相流按颗粒浓度分为稠密两相流和稀疏两相流. 稀疏两相流中的颗粒均匀分布于流体中, 分析比较简单, 因而也较成熟. 稠密两相流(如流态化)以颗粒在流体中的不均匀分布为特征, 颗粒流体相互作用非常复杂, 因而是两相流研究的难点. 根据系统中呈现的流动结构不同, 颗粒流体两相流又有聚式和散式之分. 聚式系统中颗粒和流体分离严重, 呈颗粒聚集的密相(如流态化中的乳化相)和流体密集的稀相(如流态化中的气泡)共存的两相结构; 散式系统中颗粒均匀分布于流体中, 形成均匀的颗粒流体系统. 气固系统一般呈聚式状态, 而液固系统呈散式状态, 但有时也有例外, 并且散式和聚式没有明确的界线. 颗粒流体两相流可以是水平流动, 也可以是垂直或倾斜流动; 颗粒和流体可以是同向的, 也可以是反向的, 其中垂直并流向上流动最为普遍, 因此是这里讨论的重点.

1.2 基本特征

当流体以很低的速度垂直向上通过由固体颗粒堆积而成的床层时, 颗粒重力的一部分由流体对颗粒的曳力来平衡, 颗粒处于静止状态, 称之为固定床. 随着流体速度的增加, 曳力与重力的比逐渐增加, 并在某一临界速度下达到 1.0, 此时, 颗粒完全被流体所悬浮, 床层开始具有类似流体的特征, 故称系统达到了最小流态化状态, 对应的流体速度称为最小流化速度 U_{mf} .

当流体速度超过 U_{mf} 后, 根据流体和颗粒物性的不同, 系统可以立即变为非均匀的聚式状态, 呈现气泡和乳化相共存的两“相”结构, 也可以仍然保持散式的均匀状态直到流体速度达到最小鼓泡速度 U_{mb} . 这里“相”指的是颗粒流体混合物的状态, 稀相指很少的颗粒分

* 中国科学院科技政策局资助项目

布在流体中, 密相指颗粒很密集地分布在流体中, 两相结构指的是这两种状态同时存在. 一般两相流中定义固体和流体为不同的“相”, 与这里“相”的概念不同.

1.2.1 散式系统 液固系统一般认为是散式的 (但在一定条件下, 也可呈现聚式特征), 并接近理想均匀状态. 其特征如图 1 所示. 随着流体速度的增加, 系统均匀膨胀, 直到流体速度达到某一临界速度 U_t 时, 全部颗粒被流体夹带出系统, 这一速度称为终端速度. 系统内空隙率 (流体所占体积百分比) ϵ 变为 1.0. 对散式系统而言, 流体速度与空隙率的关系为

$$U_g = U_t \epsilon^n,$$

即在对数坐标中, ϵ 和 U_g 呈线性关系.

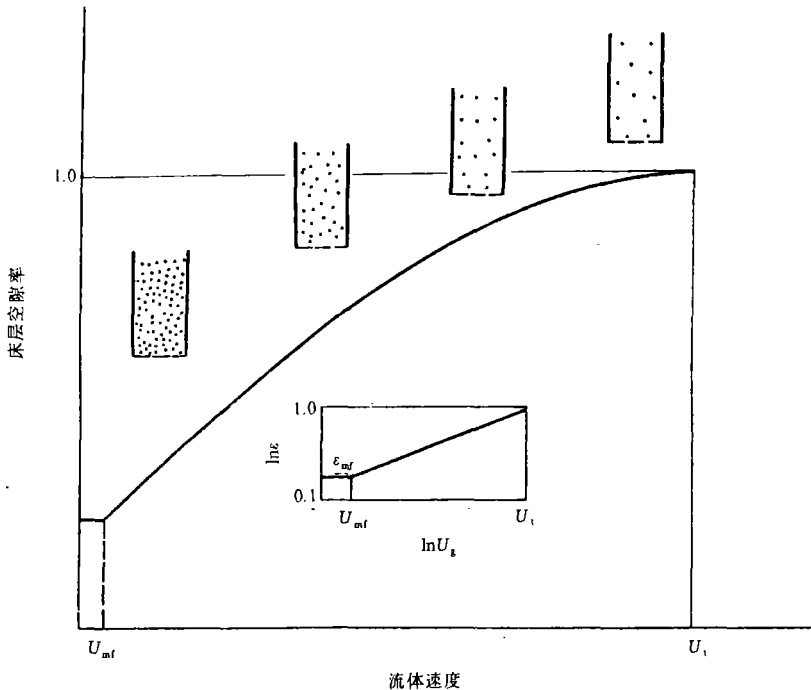


图 1 散式颗粒流体系统

ϵ ——空隙率, ϵ_{mf} ——最小流化空隙率, U_{mf} ——最小流化速度, U_g ——流体速度, U_t ——极限沉降速度

1.2.2 聚式系统 气固系统一般认为是聚式的, 但在一定条件下, 也可呈现出均匀的散式状态. 以图 2 所示的最典型的气固系统为例, 当流体速度由零增加到 U_{mf} 时, 系统达到最小流化状态, 流体速度继续增加, 系统均匀膨胀, 直到 $U_g = U_{mb}$ 时, 出现气泡, 并随气速增加, 气泡数目增加, 尺寸长大, 称此时的操作为鼓泡流态化 (在小径床中可能出现节涌现象); 之后, 当气泡体积份额随流体速度增加达到一定限度后, 原来离散的气泡变为连续的稀相, 而原来连续的乳化相变为离散的颗粒团, 这一连续相和离散相的倒置发生后系统进入湍流流化状态; 随流速的继续增加, 系统内压力波动变弱, 颗粒团聚变得更加明显, 系统进入快速流化状态; 当流速增加到临界值 U_{pt} 时, 系统内流动结构发生突变, 颗粒浓度突然降低, 进入稀相输送. 这一临界点称为“噎塞”点, 对应的颗粒流率称为饱和夹带量 K^* . 如

果外部条件许可，此时系统可以两种状态（快速流态化和稀相输送）共存。刚刚形成的稀相输送仍具有一定程度的不均匀性，当流速增加而致使颗粒浓度很低，颗粒之间的相互作用可以忽略不计时，系统达到完全均匀的稀相输送状态。

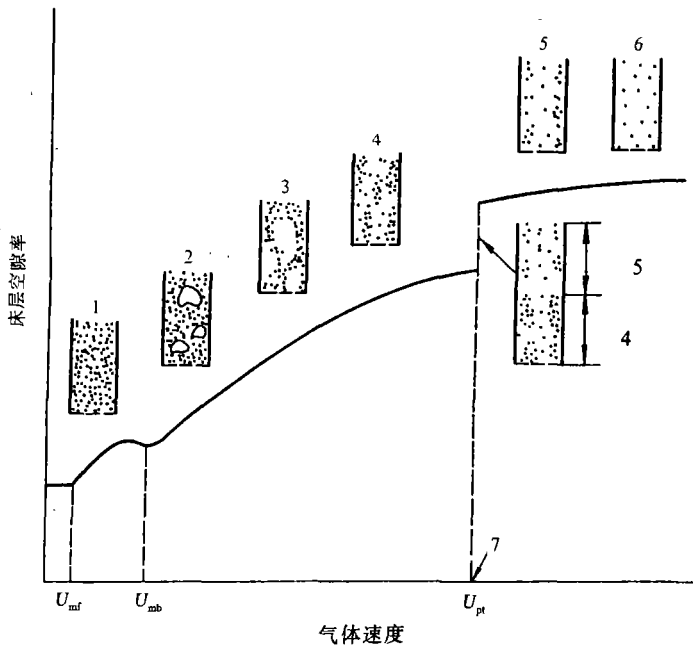


图 2 聚式颗粒流体系统

1——均匀膨胀，2——鼓泡，3——湍流，4——快速，5——输送，6——理想输送，7——对应饱和和挟带；
 U_{mf} ——最小流化速度， U_{mb} ——最小鼓泡速度， U_{pt} ——气力输送速度

在聚式系统中，除局部流动不均匀外，由于边界条件的影响，流动结构出现空间不均匀分布，即出现中心稀、边壁浓的径向分布。

1.3 主要研究内容及学科意义

颗粒流体系统最基本的特征是颗粒和流体分别聚集而形成的两“相”结构，这种两相结构随操作条件的改变会发生一系列的转折性变化，历经鼓泡、节涌、湍动、快速流态化，最后达到稀相气力输送，这一系列变化称为流“域”过渡；随流体和颗粒物理属性的改变，非均匀的聚式两相结构可以演化为均匀的散式结构，这一变化称为流“型”演变；随边界条件的不同，两相结构在系统内不同区域差别很大，这种差别称为流“区”分布。图 3 总结了这 4 种变化及其相互关系。颗粒流体两相流研究的目标是认识“相”结构、“域”过渡、“型”演变和“区”分布的规律及其定量关系。

自然界中的流动现象大都属颗粒流体系统，因此，颗粒流体系统被广泛应用在能源转换、资源利用和环境保护等过程中。颗粒多相反应不仅是煤炭、石油、矿冶等基础工业的核心过程，也是材料、生物技术、医药等许多新兴过程中的关键技术。随着更多的新兴过程的出现和对产品性能以及环境标准要求的不断提高，颗粒多相系统将向更多的领域渗透。

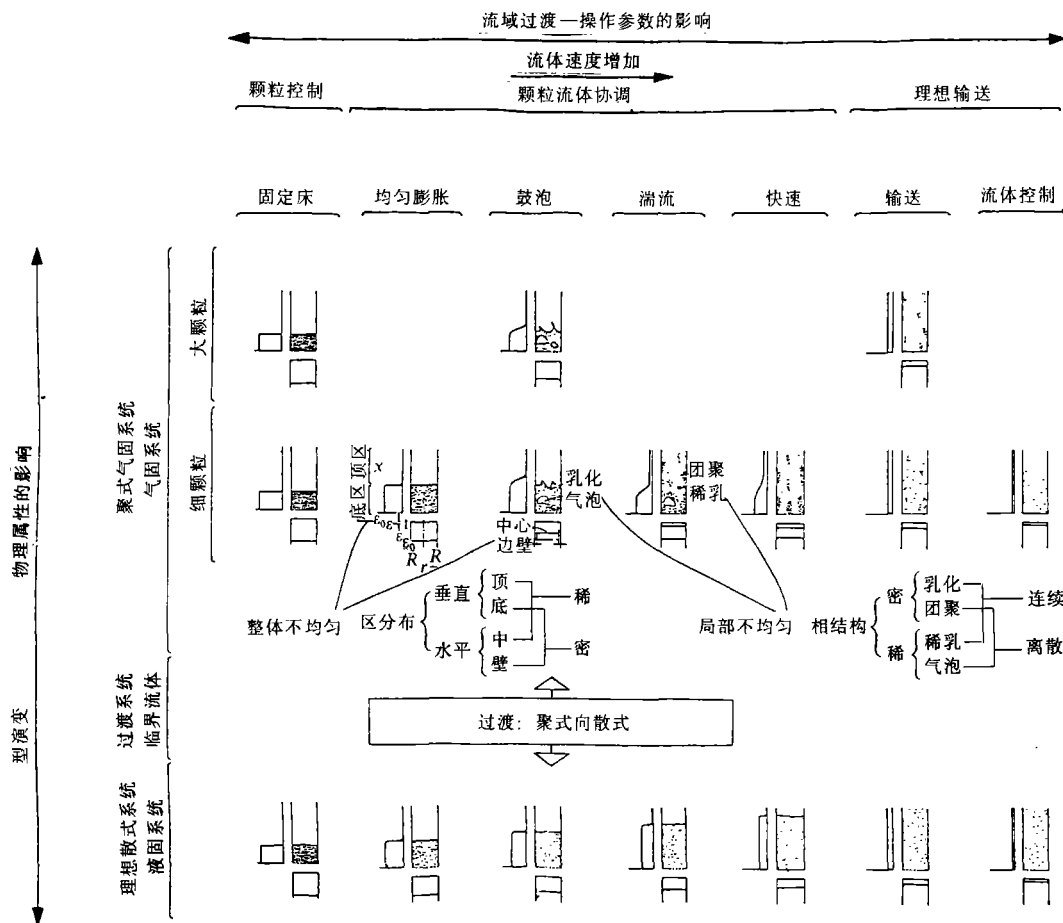


图3 颗粒流体两相流的相结构、域过渡、型演变和区分布

由此可见，颗粒流体系统研究的内容属许多工程领域的共性问题，关系到许多工程领域尚未解决的重大问题，诸如：化工反应器的定量设计，工程放大和优化操作等。目前，颗粒多相反应系统的设计和放大还处于经验摸索阶段，反应器开发周期长、费用高，失败的可能性很大，许多重要过程的开发都需耗巨资进行逐级放大，有时中试和工业化很难突破。在此种现状下，加强这一学科的基础研究，实现颗粒流体系统的定量化，必然对各种过程意义重大。遗憾的是，几十年来，传统的方法和理论在这一领域突破很少，新理论、新方法的建立势在必行。

2 现状和存在问题

颗粒流体系统内部存在着非均匀结构并伴随着时空动态行为，该系统在大多数情况下处于非线性非平衡状态^[1]，是一种典型的耗散结构。一方面，由于对非线性非平衡系统并不存在普遍适用的理论^[2]，因而，必须单独寻找这一系统的内在规律；另一方面，传统的分析方法很难对这类系统中的非均匀时空动态结构有一个完善的描述，事实上，从根本上分析

这一系统所需的数学理论和物理方法都还没有建立,非线性非平衡热力学还处在不成熟阶段,分析非均匀时空动态结构的数学分支也还在建立之中,因此,颗粒流体两相流理论的建立是力学分支中的一个难点.

目前模拟颗粒流体系统一般有两种方法,即:拟流体方法和两相结构模拟法.拟流体方法继承了单相流体力学的分析手段,将颗粒相作为连续介质处理,分别对颗粒相“流体”和真实流体列出 N-S 方程,并用本构方程使之封闭求解.这种方法很难考虑内部真实的流动结构,因而仅对均匀的稀疏颗粒流体系统有效,在处理稠密系统时遇到了难点.事实上,该方法在处理问题的过程中把所有的未知因素和拟流体带来的误差都归结到了本构方程中.因此,对这一方法改进的焦点在于对本构方程的修正.几十年来,围绕本构方程做了大量工作.但是模型中存在的诸多可调参数很难取消,其应用受到限制,其实,颗粒流体两相流与单相流动有本质的差别,模拟单相流动的方法必然在模拟多相流动时遇到困难.

另一种方法,两相结构模拟法,则以系统中的流动结构为基础,分别对流体富集的稀相和颗粒聚集的密相列出方程,并考虑稀、密两相之间的相互作用和交换.这一方法虽对流动结构有较好的描述,但却难以考虑系统内部的动态行为.虽然重点考虑了系统内部有序行为的变化规律,但对于无序的动态耗散过程则难以处理,只能把所有动态过程引起的颗粒流体相互作用的变化归结为稀、密两相之间的交换.一般来说,前一方法继承了单相流动的分析方法,适用于较稀的颗粒流体系统;而后一方法则考虑了两相结构的特点,适用于稠密两相系统.此外,颗粒轨道模型也有应用,然而它却很难用于稠密两相流的分析.目前看来,这些方法都各有优缺点,在物理方面都与实际有差异.近期很难在定量化方面有所突破.近年来在单相流体力学中出现了一些新方法,如流动现象的分子动力学模拟^[3]和格子气方法^[4]等,但目前还不够成熟,尚难应用于颗粒流体系统中.因此,由于对颗粒流体系统中复杂的流动现象认识不足和应用传统方法的“惯性”,这一领域的研究工作存在着“多重复,欠深度,缺机理”的问题,主要表现为

(1) 物理模型与现象的差别.颗粒流体系统的主要特征之一是其非均匀的两相结构及由此而产生的多尺度相互作用.其中,颗粒流体之间的相互作用是整个过程的控制因素,尤其对于像流态化这样的稠密两相流,绝大部分能量消耗于这一作用及与之联系的各种耗散过程.在流场中任何一点,稀、密相交替出现,两相内部颗粒流体相互作用差别很大.已有模型并未重点考虑颗粒/流体之间由于两者互相协调运动而产生的复杂的多尺度作用,仅用一平均曳力系数考虑这一作用,显然是远远不够的.研究表明,平均曳力系数并不足以反映非均匀系统中的颗粒流体相互作用规律.另一方面,由于两相不均匀结构的存在和颗粒流体的相互协调作用,系统内部既存在颗粒自组织这样的有序行为,又存在杂乱无章的时空动态耗散过程.很显然,完善的数学模型不仅应体现有序过程的变化规律,而且应描述无序耗散过程及其与有序行为的藕合规律.目前,已有模型并未深入到这一层次.尽管人们已注意到颗粒流体系统中的混沌现象,但描述这一现象的模型还未建立.存在的另一个重要问题是缺乏对过程非平衡特性的认识,最近的研究表明^[1],稠密颗粒流体系统处于非线性非平衡状态,是一种典型的耗散结构.随操作条件的改变,会出现非平衡相变的突变行为.有序的两相结构的出现正是这种耗散结构中颗粒与流体协调运动而发生自组织的结果.目前,所有模型中

都未考虑这一本质特性,甚至在推导本构方程时,还应用平衡态热力学或线性非平衡热力学的结论,自然很难描述这一复杂的过程.以上这些模型与现象之间的差别在模拟过程中是用引入可调参数来弥补的,这些可调参数破坏了模型的可靠性和通用性,使物理模型难以真正反映过程的本质.长久以来,大多数工作都致力于这些可调参数的选取和定义,因而难以有大的突破.

(2) 实验和模型的过分理想化.实际的颗粒流体系统中的颗粒均为具有一定粒度分布的形状非规则的颗粒,这些因素都使系统非线性特性更加复杂.现有理论和实验都是基于单一粒径的球体颗粒,尽管简化了分析和实验过程,然而却使得研究工作与实际相差甚远.目前,处理这一差异的办法是定义颗粒平均直径和球形度.但近期研究已证明,现有平均值计算方法都缺乏物理意义,易引起显著误差.此外,目前的多数模型都仅致力于过程的时间平均参数的变化,而对颗粒流体系统这样的非线性非平衡系统而言,系统内部复杂的动态变化对过程特性影响很大.研究表明,各种平均参数的场分布与瞬态参数的场分布截然不同,也就是说,平均参数无法反映系统内部进行的真实过程.因此研究结果很难应用于设计计算.

(3) 测试手段和数学物理方法的限制.如前所述,多数颗粒流体系统处于非线性非平衡状态.尽管非线性非平衡热力学是当前热力学领域的一个重要分支,但已经证明,对非线性非平衡系统而言,普遍适用的理论是不存在的^[2],因而,寻求颗粒流体系统这一特定系统的热力学规律才是解决问题的可行途径.尽管已经发现,这一系统中的耗散过程应满足熵产率最大的条件^[5],但完善的理论还有待进一步的工作.另一方面,从动力学角度考虑,对这一系统中不均匀的时空动态结构及其杂乱无章的运动的描述,是一个复杂的数学问题.在数学领域,这类问题的描述也是一个难题.这些物理和数学方法的限制,给颗粒流体系统的研究带来困难.尽管这一学科属工程科学,但其理论的建立与完善还有待物理和数学领域的最新进展,学科交叉在这一领域尤其重要.此外,测试手段的限制也妨碍了对这类系统中复杂现象的认识.现有的测试手段一般都只适用于均匀的两相流动.对颗粒浓度很高且具有两相结构的系统,其内部复杂的气固流型很难用现有测试手段来测量.因此,当前的研究只能限于对系统内部平均参数的测量,而对其内部颗粒与流体的瞬态运动规律却束手无策.尽管近年来激光全息、激光相位多普勒和快速信号处理技术的发展,为瞬态过程的测量提供了有效的手段,但这些技术也只限于在很稀的系统中应用.对稠密两相流内部的测试还只能依赖于高能射线,放射性示踪等技术,而这些技术目前只能得到平均信号.近年来,测试手段的开发已引起越来越多的重视,但存在的另一问题是这些工作较多的是注重信号的获取,而忽视了根据系统内部结构设计探针和处理信息.

(4) 共性问题认识不够.颗粒流体系统应用于许多工程领域,因此,不同领域碰到的难题是共性的.然而,不同领域的研究工作并未针对这些共性问题进行,而是强调了这些问题在特定领域中的具体表现形式.比如在气力输送管道中的噎塞现象,流态化系统中的顶部稀底部密的两区不均匀结构都属颗粒流体系统的临界现象,是非线性非平衡系统中出现的二级分支现象.但是这一共性的本质并未引起重视,因而难以突破,并造成了不同领域中对同一问题非机理性的重复研究.

总而言之,颗粒流体系统的研究目前遇到了传统理论和方法无法解决老问题和满足新要

求的挑战, 通过学科交叉另辟新径势在必行.

3 机遇和展望

颗粒流体两相流属工程科学. 在其初期发展阶段, 数据的积累和对宏观行为的认识都对学科发展及其工业应用能起推动作用, 甚至其工业应用可超前于基础研究. 然而, 当学科发展到一定阶段, 其工业应用由于基础研究的不足而受到阻碍, 定量化的需求刻不容缓的时候, 对系统内部复杂现象的机理和微观瞬态行为的认识已势在必行. 遗憾的是, 如前所述, 对颗粒流体系统这样高度非线性非平衡的复杂现象而言, 传统的研究方法和已有的理论已很难有所突破. 因此, 这一领域目前面临着老学科需要更新内容的挑战. 另一方面, 几十年来, 基础数据的积累和对相关现象认识水平的提高, 特别是近年来相关学科尤其是数学、物理和计算机技术等方面的最新进展, 为解决颗粒流体系统中久未解决的一些困难问题提供了工具和方法, 为这一领域提供了取得突破的机遇, 以下是笔者认为较重要且有希望取得突破的几个方面:

3.1 非线性非平衡特性

颗粒流体系统中的非线性非平衡特征分为两类: 一类是来源于颗粒流体相互作用的内在非线性; 另一类则起因于外界和非规则因素, 称为次生非线性. 内在非线性导致系统内部复杂的流动结构, 而次生非线性则使内在非线性的处理更加复杂, 并引起放大效应.

3.1.1 内在非线性 内在非线性起源于颗粒和流体的相互作用, 以 $Re = \frac{d_p u_f}{\nu_f} < 2$ 为例, 当流体垂直向上通过颗粒料层时, 流体流率与压力梯度之间的关系为

$$\text{流体流率} = \frac{(\text{颗粒直径})^2 (1 - \text{颗粒浓度})^{4.7} \text{压力梯度}}{18 (\text{颗粒浓度}) (\text{流体粘度})}.$$

如图 4 所示, 当流率很小时, 系统处于固定床阶段, 流体流率与压力梯度之间成线性关系. 当流体速度达到最小流态化速度时, 料层开始膨胀, 颗粒开始运动, 两者的线性关系不再成立. 非线性因素增长到某一临界值时, 系统内部结构发生突变, 形成稀密两相耗散结构. 当流体流率继续增加到另一临界值时, 系统又由非均匀的两相结构突变为均匀的稀相输送. 这一系列现象的机理在于颗粒流体在相互作用中既相互约束又相互协调. 相互约束导致两者运动趋势互相排斥, 而相互协调则使两者运动趋势互相配合. 因此, 存在 3 种可能的作用方式: 颗粒完全控制的固定床、颗粒和流体协调的流态化和流体完全控制的稀相输送^[5]. 这一变化过程中出现的非线性行为包括颗粒自组织形成的非均匀结构, 分支现象引发的突变和多态过程以及局部分支现象导致的混沌现象等. 由此可见, 颗粒流体系统中的颗粒与流体的相互作用是一种典型的非线性非平衡过程, 认识这一过程的困难在于现有理论无法提供非线性过程的稳定性判据^[2]和描述多种过程耦合而成的复杂现象的数学方法. 目前看来, 认识这种非均匀时空动态耗散结构的根本出路在于对这一系统进行多方面的分解: 即将运动分解为极值和动态, 能耗分解为可逆和耗散; 过程分解为有序和无序; 结构分解为不同尺度. 这种分解的结果, 使研究者可以从复杂的过程中找到有规律可循的成分, 并有助于了解无规律的不同侧面. 近期研究结果表明: 非均匀的流态化状态满足熵增率最大的条件^[1], 这一条

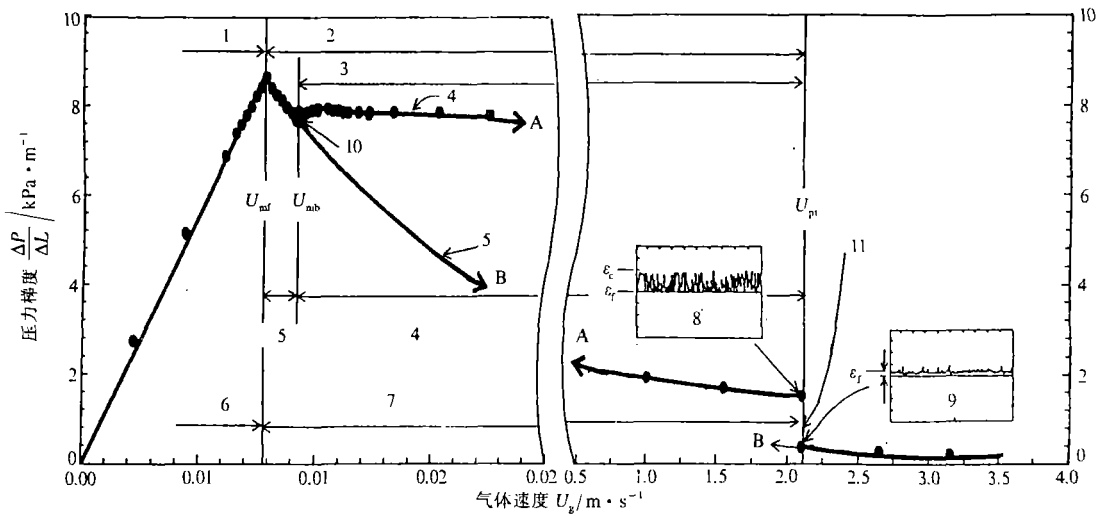


图4 在直径为90 mm的流化床中得到的实验结果

固定床流域中的线性特征和流化床流域的非线性特征：在第一分支点，鼓泡发生，流态化分为两个分支：其一为稳定分支，由于颗粒和流体的自组织而具有聚式结构，其二为不稳定分支，如图中虚线所示，具有散式结构；

第二个分支点（称为“噎塞点”）处系统内流动结构发生突变；1——线性，2——非线性，3——耗散结构，

4——聚式，5——散式，6——固定床，7，8——流态化，9——稀相输送，10——第一分支点，

11——第二分支点

件是否也适合于某些非线性非平衡过程，是一个值得进一步思考的问题。

图5所示的是颗粒流体系统中局部空隙率的分支图，它表明在固定床阶段空隙率为一常数，一旦鼓泡形成，空隙率即呈现两个交替出现的极值并随流速的增加，越来越呈现两个极值之间的离散值，表明了系统内极值和随机以及混沌行为的共存和分解的可能性。

图6表明，颗粒流体系统中的总能耗可以分解为可逆和不可逆两个分量，事实上，在流体速度为 U_g ，颗粒流率为 G_s 的非均匀颗粒流体悬浮系统中，流体消耗的能量，仅有一部分转化为机械能，大部分能量消耗于耗散过程。相对于单位截面单位质量的颗粒而言，流体消耗的总能量

$$N_T = \frac{\Delta P U_g}{\Delta L (1 - \epsilon) \rho_p} \cdot \frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_p} = \frac{(1 - \epsilon) \rho_p g U_g}{(1 - \epsilon) \rho_p} \cdot \frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_p} = U_g g \frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_p},$$

而转变为颗粒势能的能量为

$$N_t = \frac{G_s g}{(1 - \epsilon) \rho_p} \cdot \frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_p},$$

其余能量全部耗散，因此，总的能量耗散为

$$N_{dis} = N_T - N_t.$$

图6为用EMMS模型^[1,5]计算得到的各种能耗。表明，非均匀的流态化区域，能量耗散在总能耗中所占比例很大，而在理想的均匀稀相输送区域，能量耗散显著减小。由于总能量耗散 N_{dis} 与熵产率对应，因此，在用热力学方法研究系统稳定性方面， N_{dis} 趋于最大值，

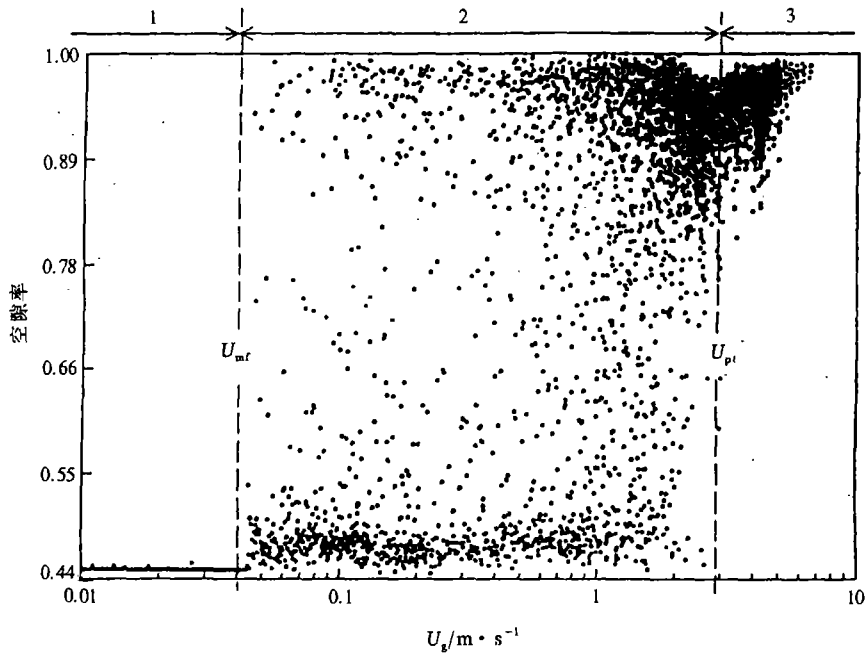


图 5 流化床中局部空隙率实验结果

固定床流域为单一恒定值；流态化流域中呈两极值交替出现并伴有混沌和随机变化；稀相输送流域中又收敛到单一值；1——固定床，2——流态化，3——输送

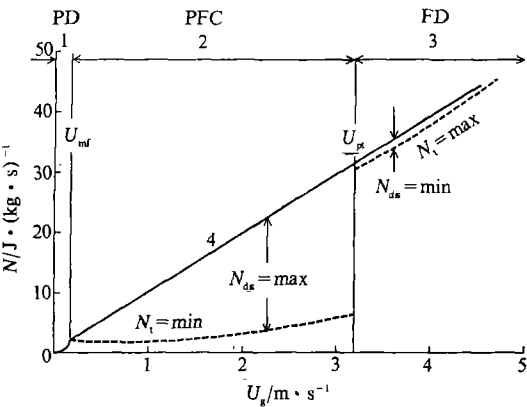


图 6 用 EMMS 模型计算得到的颗粒流体系统各流域中的能耗分配

流态化流域中耗散最大；而稀相输送流域中耗散最小 (FCC/air: $\rho_p = 930 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $d_p = 54 \mu\text{m}$, $G_s = 50 \text{ kg} \cdot (\text{m}^2 \cdot \text{s})^{-1}$)；1——固定床，2——流态化，3——输送，4——总能耗；PD——颗粒控制，PFC——颗粒流体协调，FD——流体控制， N_i ——输送能耗， N_{dis} ——耗散能耗

而在均匀的稀相输送区 N_{dis} 趋于最小值^[5]。亦即预示着熵产率在颗粒流体系统中具有极值行为。由此可见，将能耗分解为可逆和不可逆两部分的可行性和重要性。其他方面的分解，也可给出很多例子，在此不再赘述。总之多方面的分解是认识颗粒流体两相耗散结构的根本途径，应当引起足够重视。

3.1.2 次生非线性 内在非线性是认识颗粒流体相互作用规律的难点所在，而次生非线性则使这一规律在实际应用过程中更加复杂，是理论研究成果实用化的难点所在。这方面的非线性主要来自两个方面：非理想的物性和放大效应。

工业过程中的颗粒物料均具有粒度分布并为非规则形状的颗粒。由于在流速一定的前提下，流体对颗粒的曳力与直径并非成线性关系，它与颗粒形状的关系更加复杂，因而目前使用的简单的几何因素平均直径和颗粒形状系

数并不能表达这种复杂的非线性关系，给不同实验结果的比较和研究结果的应用带来了很大的困难。解决这一难题的出路在于定义平均直径时要考虑颗粒流体之间的相互作用机理或将粒度分布作为参数代替模型中的颗粒直径。图 7 为对于不规则形状的处理。目前可以通过分数维理论定义不同形状的维数，然而，如何在所定义的维数中考虑形状对颗粒流体相互作用的影响，又是一个有待解决的问题。

图 7 为考虑颗粒与流体相互作用以后得到的多组分颗粒平均直径的变化规律。表明平均直径并非常数，而是随流动参数而变，当 Reynolds 数很小时，平均值是最小值，随 Reynolds 数的增大，它逐渐增大到最大值，并变为常数。由此可见，平均值的处理在研究和工程计算中是一个很难处理的问题，对于不同的过程，处理方法也不同。目前这一问题还未引起足够重视。成为实验结果难以比较，难以推广应用的原因之一。

放大效应产生的机理在于：在不变的操作条件下，颗粒流体系统中的过程随设备结构和规模的变化而发生变化。对于单相流动而言，流速一定时，管径的变化可导致层流向湍流的过渡，这种简单的放大效应在颗粒流体系统中由于颗粒的存在更加复杂化。同时，由于不均匀结构的存在，基于平均流速的 Reynolds 数不再是这种突变发生的唯一的控制参数，而必须进一步考虑的是颗粒流体之间的其他相互作用。此时，基于因次分析的传统相似理论不再适用，而颗粒流体的其他相互作用机理必须包括在分析之中。事实上，解决这一困难问题的途径包括对设备结构和规模变化导致的分支现象的认识。而这又必须基于对径向颗粒及速率分布机理的理解。

图 8 所示为放大效应产生的机理，对某方面的指标而言，由于设备性能对规模的非线性效应，由小试和中试并不能推知更大规模或工业化后的结果。有时，这种非线性效应可表现为突变，因此，认识放大效应规律的根本出路在于对次生非线性的认识，尽管这是一个工程

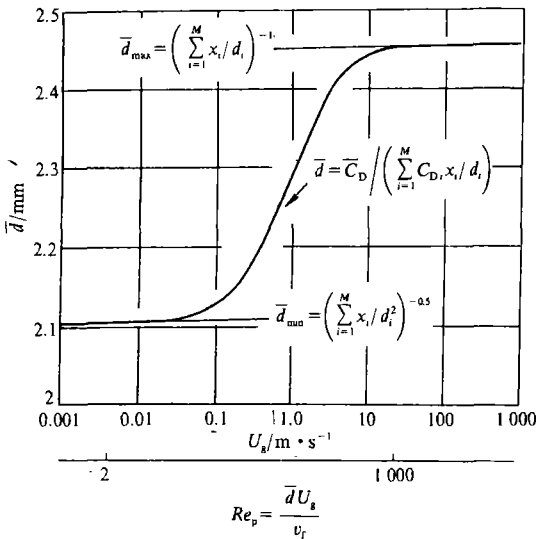


图 7 多组分颗粒流体动力平均直径随流体速度的变化
glass/air: $d_1=7.255\text{ mm}$, $d_2=4.255\text{ mm}$, $d_3=1.48\text{ mm}$,
 $x_1:x_2:x_3=2:3:4$

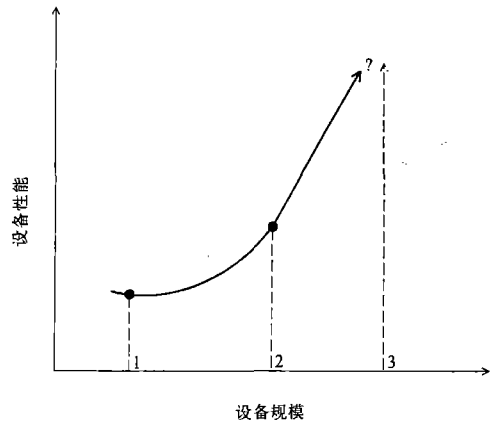


图 8 放大效应机理
由于设备性能对规模的非线性效应，小试和中试并不能预测工业化后的结果；
1——实验室，2——中试，3——工业化

问题，但却涉及到极为复杂的理论和方法，为此，集中多学科的力量是必要的。

3.2 计算机辅助实验（图形仿真）

颗粒流体系统行为的数值模拟已有了一定发展，但目前还停留在用唯象模型，如拟流体模型，进行演算的阶段。这些模型能良好成立的一个基本条件是系统处于近平衡状态，即线性非平衡状态，这对非线性行为的研究显然是不合适的。比如说，拟流体模型要系统中能存在一个对整个系统来说足够小、而其中又含有足够多颗粒的微元体，并认为微元中的各种流体和颗粒的性质是均匀的，但实际上，这样的微元未必能存在于任何系统，而且即使存在，微元内流体和颗粒的性质也经常是不均匀的，甚至存在突变。

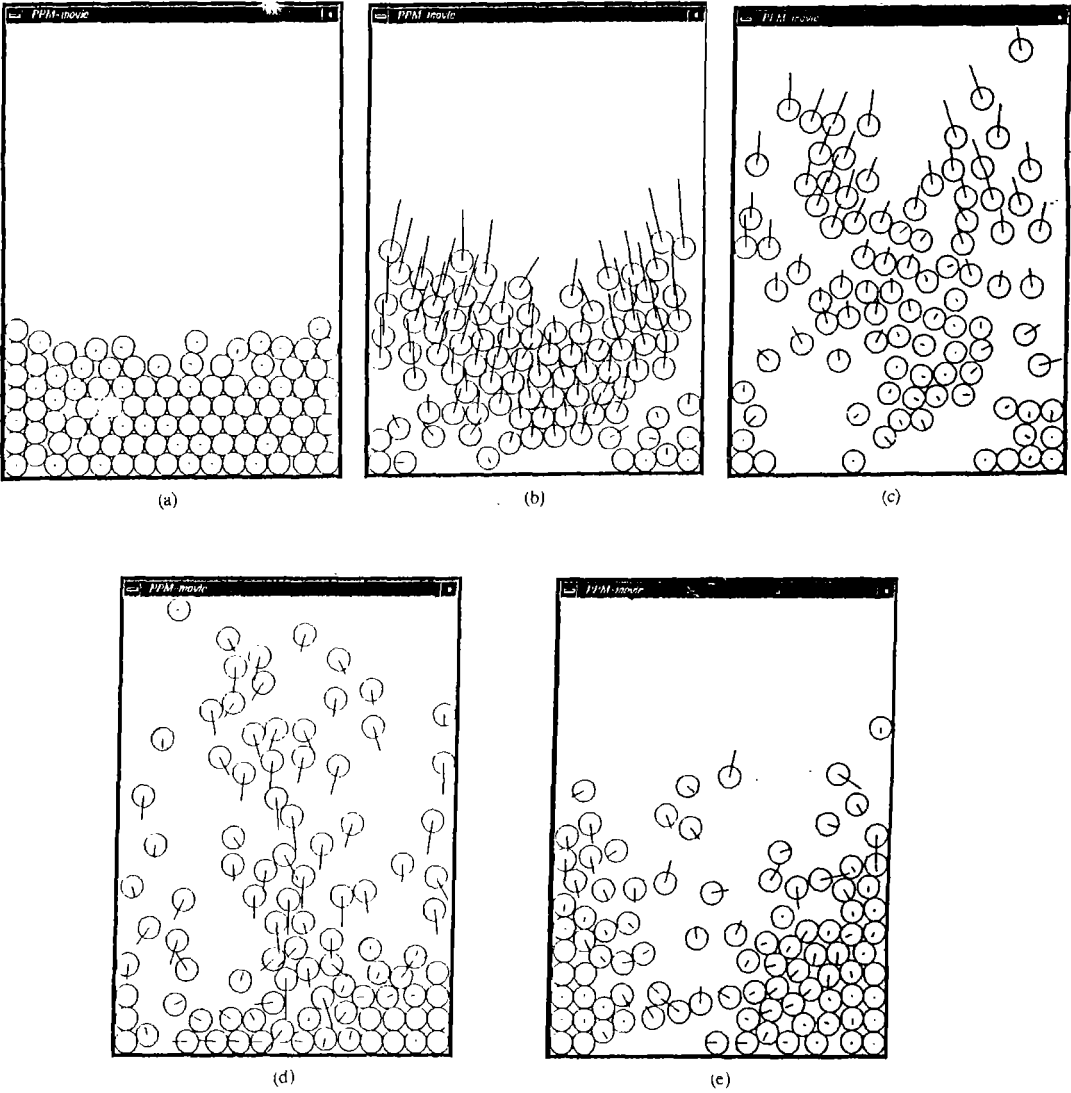


图 9 大颗粒流态化系统的离散化计算机图形仿真结果

突然对固定料层通气后，料层以“活塞”方式上升(a)，并逐渐被吹散下落(b)~(d)，最后形成“喷动”流型(e)

计算机辅助实验则是根据颗粒流体系统根本的物理图景——流体分子和颗粒各自和相互的离散作用——来建立模型,即用尺度相差很大的两种离散粒子分别代表颗粒相和流体相,通过它们之间的离散的相互作用来模拟实际的颗粒流体系统的行为,虽然这两种系统间的相似性还没有从理论上得到定量的描述,但得到了实验结果的有力支持,图9是通过计算机辅助实验模拟的大颗粒在小直径流化床中不均匀结构的形成过程,它与实验结果符合很好,但这种现象对拟流体模型来说是难以解决的,因为难以找到合适的微元体尺度。

计算机辅助实验的优势在于能完好地反映颗粒流体系统行为的本质机理,而根据本文前几节的论述,非线性又是颗粒流体系统的本质特征,因此辅助实验是解决非线性问题的一条很有希望的新途径。纯粹从计算的角度讲,辅助实验也较数值模拟有很多优势。主要是物理概念明确,不易出现不稳定性而导致结果发散,能很自然简便地处理各种复杂的边界和初始条件,如运动的边壁等。同时算法基本是并行的,符合现代计算技术的发展趋势,应用前景广阔。总之,作为一种新的研究方法,计算机辅助实验有希望能够部分取代常规实验,作为过程放大的辅助手段和一种有效的分析手段,用于认识一些用常规实验无法研究的复杂过程。

4 学科战略与建议

颗粒流体系统是一门不成熟的但应用背景十分明确的工程学科。根据我国实际情况,其基础研究应遵循“考虑问题深层次,解决问题具体化”的原则。建议注意:(1)分工协作,避免重复。颗粒流体系统涉及许多工程领域,然而其研究内容是共性的,因而,国家要统一考虑这一学科在不同领域的分布,避免不同领域对同一问题的重复研究。(2)搞好规划,明确目标。对于像颗粒流体系统这样的工程学科,基础研究的目标是实现反应器的定量设计和放大,因此,研究内容一定要有助于解决实现这一目标过程中的一些关键问题。既要避免纯工程性质的倾向,又要防止毫无应用背景的研究课题。为此,国家应该对这一学科有一个长远的规划,明确具体的目标,坚持不懈地去实现。(3)重视开发,纲在基础。颗粒多相反应器开发和工程放大过程中遇到的难点大都归因于基础研究的缺乏。因此,开发和基础研究应协调进行。

参 考 文 献

- 1 李静海,文利雄,阎周琳等.颗粒流体系统中的非线性行为和分支现象.科学通报,1995,40(20):1915
- 2 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: University of Chicago Press, 1966, 283
- 3 Meiburg E. Comparison of the molecular dynamics method and the direct simulation Monte Carlo technique for flows around simple geometries. Phys Fluids, 1986, 29: 3107
- 4 Shimomura T, Doolen G D, Hasslacher B *et al.* Calculations using lattice gas techniques. In: Doolen G D ed. Lattice Gas Methods for Partial Differential Equations, SFI SISOC. USA: Addison-Wesley Publishing Co, 1990. 3
- 5 Li Jinghai, Kwauk Mooson. Particle-Fluid Two Phase Flow-The Energy-Minimization Multi-Scale Method. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1994