Contents lists available at ScienceDirect

Engineering

journal homepage: www.elsevier.com/locate/eng

Views & Comments

走向更加绿色和智慧的过程工业

葛蔚 [a,b], 郭力 [a,b], 李静海 [a,b]

[a] State Key Laboratory of Multiphase Complex Systems, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China
[b] University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

1. 背景

过程工业的使命是将资源和能量转化为在其他行业和整个社会中使用的适当形式。从这个意义上说，过程工业覆盖了广泛的领域，包括化学/生物化学、材料、矿业、冶金、电力、食品甚至制药行业；此外，它也与机械、民用工业、电气和电子行业以及生物技术、纳米技术和信息技术等新兴领域息息相关。

尽管当前的趋势是服务业和信息产业占全球经济的比重越来越大，但不能低估过程工业的基础作用。事实上，它扮演的角色正在变得越来越重要，因为社会对过程工业的任何变化越来越敏感。同时，过程工业在支持全球经济社会快速可持续发展方面面临巨大的挑战，如因为环保而需要更精确的控制，而电子商务等新经济模式又需要生产者能更快地适应消费者日益多样化和个性化的需求。

过程工业传统上倚重于逐级试验放大以及长期的过程开发和运行的经验。这种研发模式成本高、效率低、效果差，已越来越不能满足上面提出的要求，现在迫切需要巩固并扩展过程工程的理论基础，并且在过程工业中应用其他领域和学科的新技术。下文我们将基于前期研究结果简要讨论这种新模式的最重要的方面。

2. 多尺度建模与模拟

长期以来，人们期待计算机模拟和优化对过程工程产生革命性的影响，而准确的过程量化是过程工业转型升级的关键。为此，无论是粗粒化离散方法或连续介质统计平均方法，都需要考虑大多数过程内在的多尺度特性。

过程工业中的大多数过程涉及物质与能量转化最终发生的原子或分子尺度和工业生产实际运行的设备尺度。两者跨越的时空尺度均约为10个数量级，之间还通常涉及颗粒(广义上包括气泡、液滴等其他简单微元)尺度，而两者与颗粒尺度间各自存在一个介尺度[1–3]，通常包括分子团簇和颗粒聚团。尽管可以根据它们各自的机理为每个尺度建立模型，但目前这些模型都不够完整和成熟，尤其是介尺度模型，而目前跨越介尺度的建模在理论和计算上都不可行。因此，目前基于这些模型的数值模拟大多精度较低、计算成本较高。

与简单的平均模型相比，介尺度建模的核心问题是变量数增加后动力学方程的封闭。在工程实践中经常用到半经验关联，然而，由于缺乏通用和可靠的物理背景，它们通常精度低、适用范围有限。对多相系统[4–10]和湍流[1,11]的一些研究展示了一种有效的替代方案，即引入稳定性约束。这种方法既可应用于连续方法[12,13]的统计平均以发展亚网格模型，也可应用于离散方法以建立粗粒化模型[14,15]。

3. 虚拟现实的前景

虚拟现实将成为过程工程的革命性技术，但除了一般的现象真实感，在过程工程中还应保证定量的物理真

2095-8099/© 2017 THE AUTHORS. Published by Elsevier LTD on behalf of the Chinese Academy of Engineering and Higher Education Press Limited Company. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).
英文原文: Engineering 2017, 3(2): 152–153
引用本文: Wei Ge, Li Guo, Jinghai Li. Toward Greener and Smarter Process Industries. *Engineering*, http://dx.doi.org/10.1016/J.ENG.2017.02.010

实性。

随着高清显示设备、图形处理和人机界面技术的发展，虚拟现实[16,17]近期成为信息技术的热门话题，但它目前主要应用在消费品、娱乐、培训和教育方面。而随着模拟方法、软件和超级计算的发展，一旦物理上可靠的计算机模拟能达到工程上的精度和分辨率要求，而不仅是像计算机游戏那样的现象真实感，虚拟现实将为过程工程带来革命性的变化。在严格意义上，这要求计算机模拟的速度和效率能支持过程的虚拟操作，并且最好是在沉浸式可视化的用户界面中。

尽管对过程工业中虚拟现实的要求因应用而异，但它们都远远超出了目前基于总体质量、能量平衡和预设规则的过程系统工程(PSE)模拟的能力，及广泛使用的计算机辅助设计(CAD)或计算机辅助工程(CAE)系统的能力。这些系统主要用于几何设计和静态结构分析，而不是复现过程背后的动力学本质和机制。

为了达到高精度和高速度，计算模型、软件和硬件应该在逻辑和配置上具有一致性，并且如前所述，介尺度模型应该是核心。近几年我们对多相系统的研究表明[1,2,15,18–20]，“从全局到局部”和“从分布到演化”的策略有助于实现这一目标。

虚拟现实的影响是深刻的，也是过程工业急需的。由于它不需要物理上的建造和操作就能提供一个可靠的数字化过程，并对此开展虚拟实验、观察和测量，故将以更低的成本和更高的效率进行更深入的系统优化。借助多尺度建模和超级计算提供物理真实性，虚拟现实技术的广泛应用将带来过程工程和过程工业的一场革命。

4. 大数据分析

对未来技术(如虚拟现实)产生的大量计算和测量数据的分析也需要新的科学和技术。原位可视化、数据挖掘、深度学习、人工智能等都是有前景的候选者。但在数据分析中也必须充分考虑数据的物理结构，特别是介尺度结构。

用于虚拟现实的模拟和测量所产生的数据量是巨大的。在不久的将来，每秒产生TB~PB量级的数据都不足为奇。可视化对于直观理解数据中包含的信息非常重要，但还不足以充分利用数据来揭示其内在结构和动力学机制。为此，计算与可视化的深度耦合，如原位可视化，是非常必要的，而这也能消除数据传输的瓶颈带来的可视化性能的严重下降。

目前正在发展的计算机科学方法，如数据挖掘、深度学习和人工智能，都有助于深入分析这些数据。然而，为了获得有物理意义的结果并提高数据分析的效率[3]，对这些数据的“结构”(而不是格式)的认知非常重要。否则对相同的数据可能有完全不同的解释，导致定性上的不合理的结果。将分析大型复杂网络的方法[21](如识别它们的拓扑结构)与多尺度物理建模结合，可以为此提供通用的数学工具。比如，根据反应分子动力学模拟结果构建反应路径[22–24]，或对原油和成品油供应链进行优化等。

总之，实现更环保和更智能的过程工业需要更深入地理解相关过程中的多尺度结构，以这种理解为核心、以超级计算和大数据分析为基础的虚拟现实将为过程工业带来具有革命性变革的研发模式，并将确保过程工业在未来社会中的重要基础地位。

References

[1] Li J, Ge W, Kwauk M. Meso-scale phenomena from compromise—A common challenge, not only for chemical engineering. 2009. Eprint arXiv:0912.5407.
[2] Li J, Ge W, Wang W, Yang N, Liu X, Wang L, et al. From multiscale modeling to meso-science: A chemical engineering perspective. Berlin: Springer; 2013.
[3] Li J. Approaching virtual process engineering with exploring mesoscience. Chem Eng J 2015;278:541–55.
[4] Li J. Multiscale-modeling and method of energy minimization for particle-fluid two-phase flow [dissertation]. Beijing: Institute of Chemical Metallurgy, Chinese Academy of Sciences; 1987. Chinese.
[5] Li J, Tung Y, Kwauk M. Multi-scale modeling and method of energy minimization in particle-fluid two-phase flow. In: Basu P, editor Circulating fluidized bed technology II. Oxford: Pergamon Press; 1988. p. 89–103.
[6] Li J, Kwauk M. Particle-fluid two-phase flow the energy-minimization multi-scale method. Beijing: Metallurgical Industry Press; 1994.
[7] Liu M, Li J, Kwauk M. Application of the energy-minimization multi-scale method to gas-liquid-solid fluidized beds. Chem Eng Sci 2001;56(24):6805–12.
[8] Ge W, Chen F, Gao J, Gao S, Huang J, Liu X, et al. Analytical multi-scale method for multi-phase complex systems in process engineering—Bridging reductionism and holism. Chem Eng Sci 2007;62(13):3346–77.
[9] Yang N, Chen J, Zhao H, Ge W, Li J. Explorations on the multi-scale flow structure and stability condition in bubble columns. Chem Eng Sci 2007;62(24):6978–91.
[10] Yang N, Chen J, Ge W, Li J. A conceptual model for analyzing the stability condition and regime transition in bubble columns. Chem Eng Sci 2010;65(1):517–26.
[11] Wang L, Qiu X, Zhang L, Li J. Turbulence originating from the compromise-in-competition between viscosity and inertia. Chem Eng J 2016;300:83–97.
[12] Yang N, Wang W, Ge W, Li J. CFD simulation of concurrent-up gas-solid flow in circulating fluidized beds with structure-dependent drag coefficient. Chem Eng J 2003;96(1–3):71–80.
[13] Wang W, Li J. Simulation of gas-solid two-phase flow by a multi-scale CFD approach—Of the EMMS model to the sub-grid level. Chem Eng Sci 2007;62(1–2):208–31.
[14] Xu M, Chen F, Liu X, Ge W, Li J. Discrete particle simulation of gas-solid two-phase flows with multi-scale CPU-GPU hybrid computation. Chem Eng J 2012;207–208:746–57.
[15] Lu L, Xu J, Ge W, Yue Y, Liu X, Li J. EMMS-based discrete particle method (EMMS-DPM) for simulation of gas-solid flows. Chem Eng Sci 2014;120:67–87.
[16] Heim M. Virtual realism. Oxford: Oxford University Press; 1998.
[17] Zhao Q. A survey on virtual reality. Sci China Inf Sci 2009;52(3):348–400.
[18] Ge W, Wang W, Yang N, Li J, Kwauk M, Chen F, et al. Meso-scale oriented simulation towards virtual process engineering (VPE)—The EMMS paradigm. Chem Eng Sci 2011;66(19):4426–58.

[19] Liu X, Guo L, Xia Z, Lu B, Zhao M, Meng F, et al. Harnessing the power of virtual reality. Chem Eng Prog 2012;108(7):28–33.
[20] Lu L, Xu J, Ge W, Gao G, Jiang Y, Zhao M, et al. Computer virtual experiment on fluidized beds using a coarse-grained discrete particle method—EMMS-DPM. Chem Eng Sci 2016;155:314–37.
[21] Liu H, Lu J, Lü J, Hill DJ. Structure identification of uncertain general complex dynamical networks with time delay. Automatica 2009;45(8):1799–807.
[22] Li X, Zheng M, Liu J, Guo L. Revealing chemical reactions of coal pyrolysis with GPU-enabled ReaxFF molecular dynamics and cheminformatics analysis. Mol Simul 2015;41(1–3):13–27.
[23] Zhang T, Li X, Qiao X, Zheng M, Guo L, Song W, et al. Initial mechanisms for an overall behavior of lignin pyrolysis through large-scale ReaxFF molecular dynamics simulations. Energy Fuels 2016;30(4):3140–50.
[24] Zheng M, Wang Z, Li X, Qiao X, Song W, Guo L. Initial reaction mechanisms of cellulose pyrolysis revealed by ReaxFF molecular dynamics. Fuel 2016;177:130–41.