

文章编号:1000-582X(2008)01-0061-06

基于现象的复杂系统建模方法

马 旭,杨 晨,张雨英
(重庆大学 动力工程学院,重庆 400030)

摘 要:提出了基于现象的复杂系统建模方法,给出了不同尺度间的耦合方案。将单体检式固体氧化物燃料电池(SOFC)划分成流动现象、传热现象以及反应扩散现象。对流动、传热现象采用 CFD 模型,对反应扩散现象采用格子波尔兹曼(LBM)模型。并且采用全局型的数据库对流动、传热以及反应扩散现象进行耦合。

关键词:复杂系统;多尺度;基于现象的建模方法

中图分类号:TP391

文献标志码:A

Phenomena-Based Modeling Methodology Research of Complex System

MA Xu, YANG Chen, ZHANG Yu-Ying

(School of Power Engineering, Chongqing University, Chongqing 400030, P. R. China)

Abstract: A phenomena-based modeling methodology was proposed and the coupling scheme of different scales was given. Monomer to the solid oxide fuel cell (SOFC) was divided into flow, heat transfer and reaction-diffusion phenomena. The flow and heat transfer phenomena were simulated with CFD methodology and the reaction-diffusion phenomena was simulated with Lattice Boltzmann methodology. The flow, heat transfer and reaction-diffusion phenomena were coupled by a database.

Key words: complex system; multi-scale; phenomena-based modeling methodology

目前,过程工业中复杂系统的工艺和设备的量化设计和放大仍难以实现,新系统的开发也只能靠经验,常常带有缺陷,工业过程中所涉及到的系统大多都是由若干个子系统构成的复杂系统,所谓的复杂系统是指具有大量交互成分,其内部关联复杂、不确定、总体行为具有时空多尺度特性,即不能通过系统的局部特性,抽象地描述整个系统特性的系统。由于复杂系统是一个无法重现,不可计算的系统,对这样不可计算系统的研究,系统仿真是一个重要的、甚至是唯一的研究手段。而建模理论与仿真方法是核心问题,即如何对目标系统建立仿真模型。国内外研究表明,传统的建模方法(诸如还原论方法、归纳推理方法等)已经不能很好地刻画复杂系统,需要

采用新的建模理论与仿真方法^[1]。

事实上,很多复杂现象的根源在于无数个微小尺度单元的相互作用,如能描述这些微小尺度单元及其相互作用则可复现全部过程。这是实现过程工业量化设计和放大的根本途径,而多尺度分析方法则正是抓住多尺度效应这一重要特征进行简化分析,尽管还未深入到微观过程的所有细节,但却涉及到了过程的内在机制,是一种有效的甚至在某些情况下是唯一的途径。针对复杂系统的多尺度效应,笔者提出了一种基于现象的建模方法,其基本思想是通过模拟客观对象,将复杂系统划分为与之相应的现象,以自底向上的方式,从研究个体微观行为着手,进而获得系统宏观行为^[2]。

收稿日期:2007-09-22

基金项目:国家自然科学基金资助项目(50576106)

作者简介:马旭(1983-),男,重庆大学硕士研究生,研究方向为先进能源系统仿真;杨晨(联系人),男,重庆大学教授,博士生导师,E-mail:yxtyc@cqu.edu.cn。

1 现象及多尺度的定义

现代汉语中,现象一词的含义指事物在发展、变化中所表现的外部的形态和联系。文中这样描述现象:系统中的个体和个体之间,个体和环境之间的相互联系,相互作用,称之为“现象”。复杂系统是由不同尺度的若干现象组成的,对这些现象的描述过程,称之为基于现象的建模方法。

多尺度包括两方面的含义:一个是空间上的,即把所有复杂系统在空间上划分成若干个层次,如:微观尺度、介观尺度、宏观尺度等;一个是时间上的,工业过程中有快过程和慢过程,以前研究的大都是快过程,在研究复杂系统过程时必须研究快过程,慢过程以及快过程和慢过程的组合等^[3]。

目前,由于复杂系统的涵盖范围很广:从自然界演化来的复杂系统,如生命、地形和自然现象;存在于社会中的复杂系统,如生理学、生态学、经济学;人类生产活动创造出的复杂系统,如流体流动、化学过程、互联网、交通系统等。研究人员应该从复杂系统的一般性质出发,采用从特殊到一般的方式来对复杂系统进行研究。从不同领域的复杂系统着手,逐步总结出复杂系统的一般性质:1)复杂系统是由若干个相互作用的个体或者子系统构成;2)复杂系统具有多尺度结构;3)复杂系统是一种开放式的系统,并具有自适应环境的特性;4)在动态过程中,与环境进行稳定的能量、物质和信息交换;5)整个过程中,至少有两种控制机制协调管理^[4]。

2 基于现象的建模技术

文中提出的基于现象的建模方法和已有的建模方法不同,已有的基于现象的建模方法其实质是一种建模框架,这种建模框架包含基于现象的模拟语言和逻辑算法。模拟语言,依据相互作用的物理化学现象描述化学过程,提供一个信息库来描述集总参数的拓扑结构和分层结构。逻辑算法使模拟过程系统化,能够清晰的捕捉模拟步骤。这使计算机为分析和构建基于现象的模型提供辅助,能够检测模型是否矛盾,能够检测模型是否完整,并且自动地从化学工程的第一定律出发获得模型的方程^[5]。

而文中提出的基于现象的建模方法其本质为实现复杂系统的多尺度模拟,在宏观尺度上可采用机理建模方法(如过程模拟和 CFD 模拟),在介观尺度上可采用诸如格子 Boltzmann 方法,在微观尺度上可采用如分子动力学及量子力学等方法。文中从实用的角度出发,当机理模型能很好的描述复杂系统的过程时,仍然采用传统的基于机理建模方法的过程模拟或 CFD 模拟等;当机理模型描述复杂系统的过程现象存在困难或有一定缺陷时,可采用能较好地

弥补机理建模不足的方法如介观尺度上的格子 Boltzmann 方法或微观尺度上的分子动力学或量子力学等方法。在计算条件有限的情况下,要实现多尺度模拟应尽量使计算量在可实现的范围内,在这方面,格子 Boltzmann 方法将是一个很好的选择。

该建模方法采用一个全局类型的数据库来实现不同尺度模型的集成和耦合,其原理如图 1 所示。

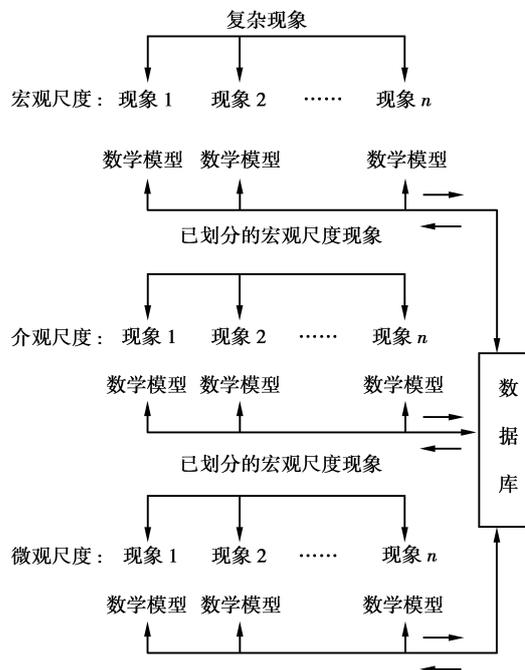


图 1 不同尺度模型的集成和耦合原理图

现象是系统的外在表现,机理是产生现象的原因。不同的现象可能由相同的机理产生,例如:在流动现象中,流动可分为层流和湍流,它们所表现出来的现象是不相同的,但却由相同的 $N-S$ 方程来控制;而相同的现象也有可能由不同的机理产生,例如:在传热现象中,传热可由导热、对流和热辐射 3 种方式产生,显然 3 种方式的机理是不同的,但同样都产生了传热的现象。对于前者,相同机理产生两种不同现象的原因是控制参数不同,类似这样的问题都可以采用机理模型来解决,只是在不同的流动阶段采用不同的控制参数。而对于后者,不同的机理却产生了相同的现象,这类问题要考虑系统中具体存在那种传热方式,然后从现象出发,把导热、对流和热辐射 3 种数学模型采用一种等效方程来代替,这样可以解决不同机理产生相同现象的问题。因此,对现象和机理的分析是基于现象建模方法的关键。

3 基于现象建模方法的一般步骤

图 2 是基于现象的复杂系统建模仿真方法的步骤,建立现象模型是其中的重点,也是基于现象的建模与仿真的精髓^[6-8]。

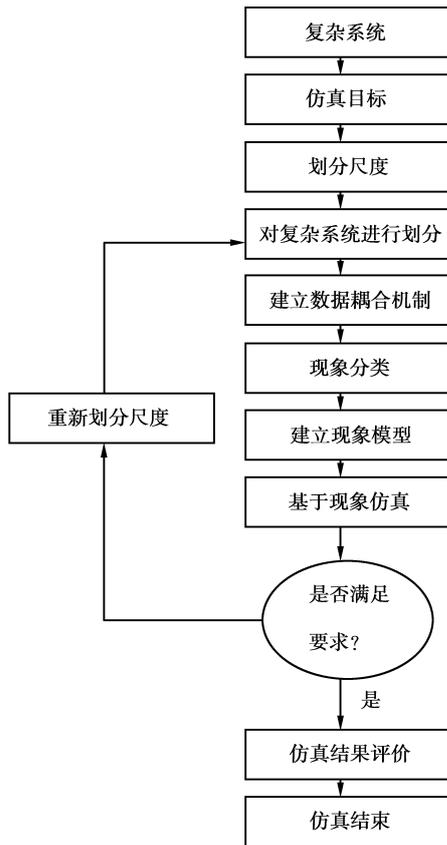


图 2 基于现象的建模方法步骤

4 格子 Boltzmann 方法(LBM)在多尺度模拟中的作用

格子 Boltzmann 方法(LBM)是一种基于分子运动论和统计力学理论的流体计算方法。与以宏观连续方程为基础的传统计算流体力学(CFD)方法不同,LBM 是基于流体介观模型的方法。与传统的计算流体力学方法相比,LBM 具有许多独特的优势,如计算效率高、边界条件容易实现、具有完全并行性等。目前,除了在一般的流体力学问题中得到了成功的应用外,LBM 已经在多相流、多孔介质流、悬浮粒子流、反应流、磁流体力学和生物力学等领域取得了很大的成功。

格子 Boltzmann 方法是由 McNamara 和 Zanetti 于 1988 年提出的,这种模型中模拟的对象不是数目庞大的流体分子个体,而是数目大大减少的流体粒子,即微观充分大、宏观充分小的流体分子微团。采用单粒子分布函数来代替格子气自动机(Lattice Gas Automata, LGA)中的布尔变量,其具体形式如下

$$f_i(x + e_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) + \Omega_i(f(x, t)), \quad (1)$$

其中: f_i 是沿 i 方向的粒子速度分布函数; e_i 是当地粒子速度; $\Omega_i(f(x, t))$ 是碰撞算子,它表示发生碰撞后 f_i 的表化率。采用线性化碰撞算子的 LBM 数学模型如下

$$f_i(x + e_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) + \frac{f_i^{eq}(x, t) - f_i(x, t)}{\tau}, \quad (2)$$

其中, f_i^{eq} 是 f_i 的平衡状态; τ 是松弛时间。

$$\rho = \sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq}, \quad (3)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i e_i f_i = \sum_i e_i f_i^{eq}, \quad (4)$$

$$\frac{D}{2} \rho \theta = \sum_i \frac{1}{2} (e_i - \mathbf{u})^2 f_i = \sum_i \frac{1}{2} (e_i - \mathbf{u})^2 f_i^{eq}. \quad (5)$$

其中: D 是速度空间的维数; \mathbf{u} 是速度; θ 是标准化温度或内能密度。

通过选取恰当的平衡态分布函数,使用 Chapman-Enskog 方法和多尺度展开技术,可以得到如下形式的 Euler 方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla(\rho \theta + \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = 0, \quad (7)$$

对于反应扩散现象,采用 LBM 方法,其基本思想是在碰撞项中加入反应项^[9],具体形式如下

$$\Omega_i(x, t) = \Omega_i^{NR}(x, t) + \Omega_i^R(x, t), \quad (8)$$

其中

$$\Omega_i^{NR} = -\frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)), \quad (9)$$

$$\Omega_i^R = R(\rho) / M, \quad (10)$$

将式(8)、(9)和(10)代入式(1),利用多尺度展开技术可得到宏观的反应扩散方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D' \nabla^2 \rho + R(\rho), \quad (11)$$

其中: M 是格子模型中的速度数; D' 为扩散系数; $R(\rho)$ 是反应扩散方程里出现的反应项,形式由具体化学反应决定。

格子 Boltzmann 方法从描述流体分子微团出发,有效的模拟了多个单粒子分布函数的流动和碰撞过程,并通过模型 3、4 和 5 将介观尺度的单粒子分布函数与宏观尺度的密度、速度、内能有机的结合起来,建立了不同层次之间参数的联系机制,解决了不同层次模型耦合的问题,实现了从介观尺度向宏观尺度的跨越。LBM 从介观尺度的机理出发逐步揭示出宏观尺度上各种流动,传热及反应扩散等现象的机理,将介观尺度上流体分子微团的各种特性逐步反映到宏观尺度的现象中,从而对实现多尺度模拟起到了非常重要的作用^[10]。

LBM 在基于现象的建模方法中的应用,有望为其在多尺度模拟中的应用开辟新的道路,推动多尺度模拟理论的发展。

5 基于现象的建模方法应用示例

固体氧化物燃料电池(Solid Oxide Fuel Cell,简称 SOFC),适用于大型发电厂及工业应用。SOFC 的工作温度为 800~1 000 ℃,可以对天然气实行内部重整。SOFC 的基本工作原理是燃料和空气经压缩提高压力并预热,分别送到 SOFC 的阳极和阴极。燃料在进入阳极前与一定量的水蒸气混合,以便在 SOFC 中进行重整。在阳极室,甲烷与水蒸气发生重整反应和置换反应,产生氢气。空气中的氧在阴极/电解质界面被还原成氧离子(得到电子被还原),氧离子在电场作用下,通过电解质中的氧空位迁移到阳极上。在阳极,氧离子与氢气发生电化学反应,生成水,放出电子。电子通过外电路返回阴极/电解质界面,形成回路,产生电能,其原理如图 3 所示。

基本化学反应为



总体反应为

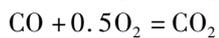
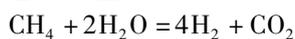


图 3 SOFC 工作原理

在 SOFC 中,现象一般划分为流动现象、传热传热现象、反应扩散现象等,这些现象如何耦合是基于现象建模中的关键问题,传统的过程仿真大多采用质量、动量和能量三大守恒方程,往往针对能量守恒方程中的传热项以及热源项进行耦合,这种方法对于多尺度问题的某一个层次是适用的,但是对于多层次之间的耦合就会存在一定的问题,比如介观尺度的模型参数如何反映到宏观尺度中,因此,建立不同层次之间的信息交互机制就显得特别重要,格子 Boltzmann 方法(LBM)就能很好地解决这一问题。

对 SOFC 采用基于现象的建模方法的技术路线(如图 4),在宏观尺度上,采用 CFD 模型模拟流动以及传热现象,对于阳极内发生的电化学反应扩散现象,由于阳极内为多孔介质,其内部的介质分布不连续,因此采用介观尺度上的 LBM 模型模拟反应扩

散现象。

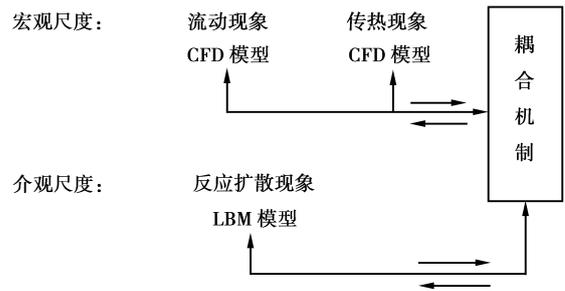


图 4 管式 SOFC 基于现象的建模方法技术路线图

作为示例,文中采用 CFD 工具模拟管式 SOFC 中的流动现象和传热现象,结果如图 5-10 所示。

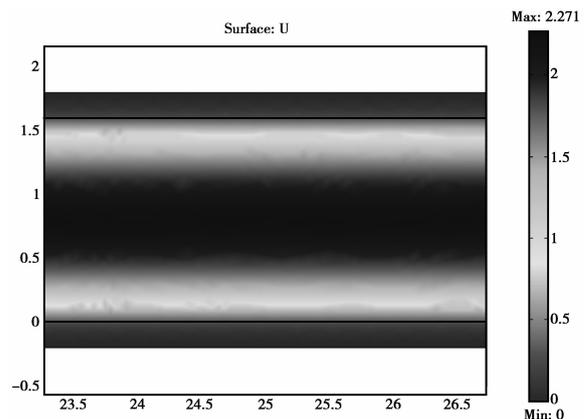


图 5 管式 SOFC 流场分布

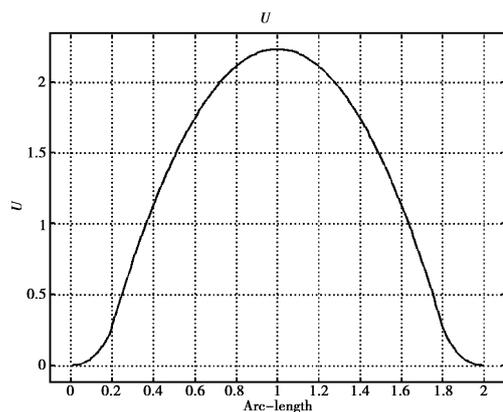


图 6 管式 SOFC 中截面速度分布

图 5 的流场分布与理论上的流场分布基本上是一致的,所不同的是管子壁面采用的是多孔介质,图 6 是管子中截面的速度分布曲线,与泊肃叶(Poiseuille)流动基本上是一致的,不同的是模拟出了多孔介质中的速度分布情况,图 7 是管壁沿中轴线方向上的速度分布,其分布呈现准周期性变化,与管壁中轴线截面上多孔介质的准周期性分布相一致。

由图 8-10 可以看出沿着流动方向,管壁温度和流道温度逐渐升高,由于入口处管壁和空气有较大的温差,因此图 8 管壁入口段温度有所下降,图 9

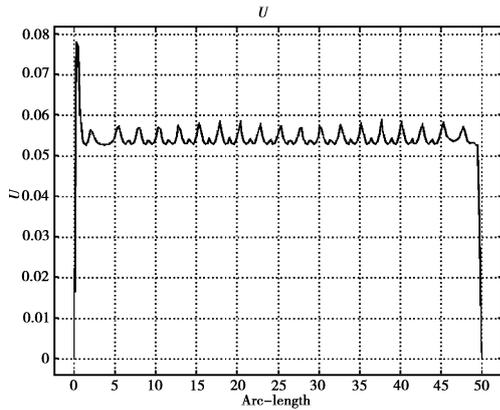


图7 管式 SOFC 管壁中轴线速度分布

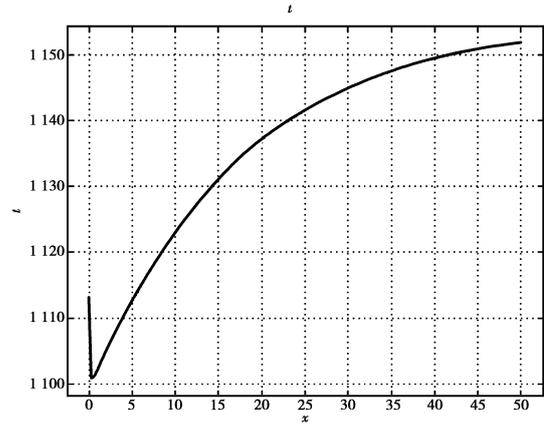


图10 管式 SOFC 流道温度分布

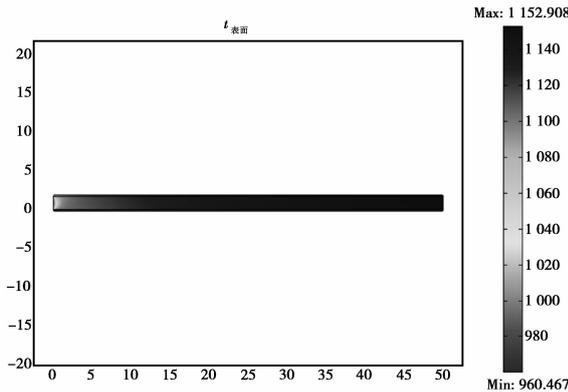


图8 管式 SOFC 温度场分布

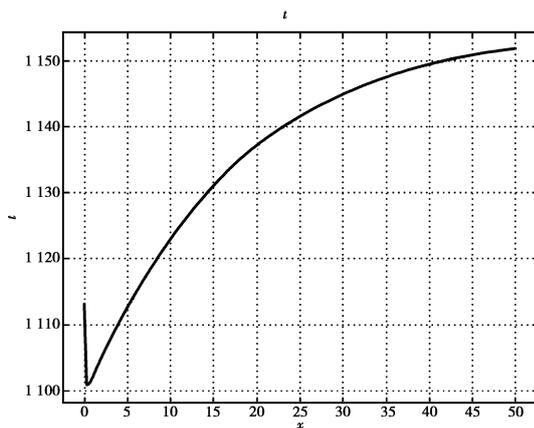


图9 管式 SOFC 管壁温度分布

流道入口处温度急剧上升。

6 基于现象的建模方法分析

采用基于现象的建模方法拟解决空间多尺度模拟及耦合问题,文中主要针对介观尺度、宏观尺度进行模拟及耦合。采用基于介观尺度的 LBM 模型描述 SOFC 的电化学反应扩散现象,从国内外的研究表明,LBM 在反应扩散问题上已经取得了很大的成功,所以采用 LBM 模拟电化学反应扩散问题是行之有效的。对 SOFC 宏观尺度上的流动、传热现象采用 CFD 模型描述,现有的流动、传热模型是相当成熟的,已经广泛应用在各行业中。多尺度模拟问

题中,不同尺度模型的集成是一个非常重要的问题。由于不同领域的多尺度现象千差万别,进行仿真活动所采用的工具和手段也因人而异,因而不可能存在普适的方法来进行模型的集成。文中对不同尺度的模型采用动态关系数据库,用以实现每个尺度模型的信息能够传递到其它任何一个尺度的模型中。

目前建模与仿真的发展趋势是从宏观到介观、微观,即从传统的计算机辅助过程分析工具(如对大型综合系统的模拟)到分子级现象的模拟。在微观领域的仿真如计算化学、分子动力学模拟以及宏观领域中的过程综合和集成越来越在基础研究里起到重要的作用。在以往单一尺度的模拟中,尽管取得了一定的成果,但仍然存在一些问题:

- 1) 无法恰当的描述科学问题中的疑难问题;
- 2) 难以描述复杂现象中的本质问题;
- 3) 计算机能力的本质限制;
- 4) 仿真数据的分析存在不足;
- 5) 缺乏用于初始化和验证仿真的实验数据;
- 6) 现有算法难以适应不断增加的模型规模和精度要求;
- 7) 计算机硬件的速度和效率的限制。

多尺度模拟是解决上述问题有效的、甚至是唯一的解决办法。多尺度模拟在时间和空间尺度上划分出不同的层次,每个层次涉及不同的仿真方法和手段。对复杂系统采用多尺度模拟不但可以揭示复杂现象的本质,而且使复杂系统的量化设计和放大成为了可能。目前在工程领域中,一些参数往往靠经验选取,多尺度模拟可对这些参数进行计算。多尺度模拟是未来仿真发展的趋势,是大型复杂系统最有力的描述手段,因此,丰富多尺度理论对未来仿真技术的发展尤为重要。

7 结束语

复杂系统的研究一直是系统科学和仿真领域的重要内容。文中提出新的建模方法——基于现象的建模方法,该方法本质上为多尺度建模方法,在

计算条件有限的情况下,对流动现象和传热现象采用机理建模方法,对在阳极内发生的电化学反应现象采用格子 Boltzmann 方法,同时运用一个全局类型的数据库来耦合不同尺度的模型。

参考文献:

- [1] 罗批,司光亚,胡晓峰. 基于 Agent 的复杂系统建模仿真方法研究进展 [J]. 装备指挥技术学院学报, 2003, 14(1):78-82.
LUO PI, SI GUANG-YA, HU XIAO-FENG, et al. Review of agent-based modeling and simulation in complex system [J]. Journal of the Academy of Equipment Command & Technology, 2003, 14(1):78-82.
- [2] 李静海,葛蔚. 过程工业中的多尺度效应及离散化单元模拟 [J]. 化工进展, 1999(5):11-13.
LI JING-HAI, GE WEI. Multi-scale effect and discrete element simulation in process industries [J]. Chemical Engineering Progress, 1999(5):11-13.
- [3] 王夔. 突破层次、尺度和时间跨越,向复杂系统逼近——今后化学发展的趋势之一 [J]. 自然科学进展, 2000, 10(8):693-697.
WANG KUI. Breakthrough levels, scale and time lea Pto the approximation of complex systems——one of the chemistry development trend [J]. Natural Science Progress, 2000, 10(8):693-697.
- [4] JIN HAI LI, JIAY UAN ZHANG, WEI GE, et al. Multi-

scale methodology for complex systems [J]. Chemical Engineering Science, 2004(59):1687-1700.

- [5] JERRY BIESZCZARD. A Framework for the Language and Logical Computer - Aided Phenomena - Based Process Modeling [C] // The paper for doctor's degree. B. S. Chemical Engineering University of Connecticut, Storrs, 2000.
- [6] A A LINNINGER, S CHOWDHRY, V BAHL, et al. A system approach to mathematical modeling of industrial processes [J]. Computers and Chemical Engineering, 2000(24): 591-598.
- [7] ANDREAS A. Linninger Recent Advances in process System Engineering [M]. Budapest, Hungary: Technology Conference, 2001.
- [8] 廖守亿,戴金海. 复杂适应系统及基于 Agent 的建模与仿真方法 [J]. 系统仿真学报, 2004, 16(1):113-117.
LIAO SHOU-YI, DAI JIN-HAI. Study on Complex Adaptive System and Agent - Based Modeling & Simulation [J]. Journal of System Simulation, 2004, 16(1):113-117.
- [9] S CHEN, S P DAWSON, G D DOOLEN, et al. Lattice methods and their applications to reacting systems [J]. Computers chem Engng, 1995, 19(6): 617-646.
- [10] 郭照立, 郑楚光, 李青, 等. 流体动力学的格子 Boltzmann 方法 [M]. 武汉: 湖北科学技术出版社, 2002.

(编辑 陈移峰)

(上接第 60 页)

参考文献:

- [1] 李刚,童颖. 基于混合概率模型的无监督离散化算法 [J]. 计算机学报, 2002, 25(2): 158-164.
LI G, TONG F. An unsupervised discretization algorithm based on mixture probabilistic model [J]. Chinese Journal of Computers, 2002, 25(2): 158-164.
- [2] STEPHEN D B. Detecting group differences: mining contrast sets [J]. Data Mining and Knowledge Discovery, 2001, (5): 213-246.
- [3] STEPHEN D B. Multivariant discretization for set mining [J]. Knowledge and Information Systems, 2001, (3): 491-512.
- [4] 谢宏,程浩忠,牛东晓. 基于信息熵的粗糙集连续属性离散化算法[J]. 计算机学报, 2005, 28(9): 1570-1574.
XIE H, CHENG H Z, NIU D X. Discretization of continuous attributes in rough set theory based on information entropy [J]. Chinese Journal of Computers, 2005, 28(9): 1570-1574.
- [5] 王立宏,吴彦,吴耿锋. 离散格的一种启发式搜索算法 [J]. 计算机应用, 2004, 24(8): 41-43.

WANG L H, WU Y, WU G F. Heuristic algorithm for discretization lattice searching [J]. Computer Applications, 2004, 24(8): 41-43.

- [6] NGUYEN H S, SKOWRON A. Quantization of real value attributes: Second Annual Joint Conference on Information Sciences (JCIS '95) [C], Wrightsville Beach, North Carolina, USA, 1995:34-37.
- [7] 苗夺谦,王珏. 粗糙集理论中概念与运算的信息表示 [J]. 软件学报, 1999, 10(2): 113-116.
MIAO D Q, WANG J. An information representation of the concepts and operations in rough set theory [J]. Journal of Software, 1999, 10(2): 113-116.
- [8] 耿志强,朱群雄,李芳. 知识粗糙性的粒度原理及其约简 [J]. 系统工程与电子技术, 2004, 26(8): 1112-1116.
GENG Z Q, ZHU Q X, LI F. Principle of granularity of knowledge roughness and reduct computing [J]. Systems Engineering and Electronics, 2004, 26(8): 1112-1116.

(编辑 吕建斌)