

# 复杂反应流自适应化学理论计算的研究现状

乔 瑜<sup>1</sup>, 徐明厚<sup>1</sup>, 徐晓光<sup>1</sup>, Pisi. Lu<sup>2</sup>

(1. 华中科技大学煤燃烧国家重点实验室, 湖北 武汉 430074;

2. Department of Chemical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, 77 Massachusetts Ave. Cambridge, MA 02139)

**摘 要:**麻省理工学院化工系的 Green 教授提出了自适应化学理论 AdapChem 的概念, 它采用相容分割法将守恒方程划分为化学方程和流动方程两个有机的部分。根据反应条件的不同, 这种方法分别使用多个简化化学反应模型, 而非复杂的详细基元反应模型进行区域内的数值模拟, 为我们提供了在保证化学精度条件下, 避免效率浪费的一条有效途径。然而, 为了完善 AdapChem, 引入以往没有考虑过的辐射模型是有必要的, 我们使用的是离散坐标法。针对 CH<sub>4</sub>/空气火焰的模拟结果显示: 引入辐射模型后, 计算结果的图形没有明显的变化, 而且温度又合理的降低。

**关 键 词:**自适应化学; 相容分割法  
简化模型; 离散坐标法

中图分类号: O643

文献标识码: A

## 1 引 言

近几十年以来, 实际燃烧装置内的流动、燃烧过程的数值模型研究取得了长足的发展。研究者们把更多的精力集中在流动问题的研究上, 而对燃烧过程中的化学反应本身考虑较少。受计算机储存功能和运算速度的限制,

以往的数值模拟研究都采用了很简单的化学反应机理模型, 然而, 简单的化学反应模型往往不能全面、精确描述火焰的某些特征, 尤其在污染物排放的预报方面。近期, 随着计算机技术的进一步发展, 在简单系统数值模拟过程中采用较为复杂的化学反应模型已经成为可能, 但在求解大型燃烧装置中包含详细反应机理的反应流动守恒方程仍然是十分困难和费时的。正因为如此, 国内外学者一直在寻求一种对复杂反应流问题进行相当精确而经济的模型求解方法。

实际的研究表明: 化学反应机理越复杂, 计算机在求取反应化学项的时间所占系统总计算时间的比例越大。在过去的 20 年中, 人们一直在探索复杂化学反应动力学机理的简化方法, 希望通过对反应过程的简化节省计算资源和所需的时间。正是在这样的背景下, 美国麻省理工学院 MIT 化工系的 Green 教授等人提出了自适应化学理论 (AdapChem) 的概念<sup>[1~2]</sup>。

在 AdapChem 中, 原来复杂的化学反应模型被简化为适用于

不同空间区域和反应条件下的若干个小的简化反应模型。针对空间某一网格, 系统只调用被简化过的反应模型进行化学项的数值模拟。采用这一方法, 可以实现在保证精度的同时, 大大减少计算所需的时间。这一方法在概念上与 Pope 提出的当地自适应列表法 (ISAT)<sup>[3]</sup>、Tones 等人提出的解法图分段重复利用法 (PRISM)<sup>[4]</sup> 有相似之处, 只是 ISAT、PRISM 对具体反应条件下精确的一般微分方程 (ODE) 的模拟解法采用代数近似, 而 AdapChem 采用简化的 ODE 模型, 因而较代数近似的方法适用范围更广泛。它具有一般方法不具备的模拟复杂燃烧问题的能力, 如火箭发动机中的燃烧过程。

在以往的计算模型研究中, 人们往往应用同一复杂机理计算各处的化学反应, 而不管所在燃烧区域之不同, 其结果是耗费了大量的 CPU 计算时间。实际上在很大的燃烧区域范围内, 这种复杂的反应机理是不必要的。在 AdapChem 中, 只是计算特定流动区域里的主要的反应。比如预混火焰由预混区、火焰区和排烟区

收稿日期: 2003-09-01; 修订日期: 2003-12-01

基金项目: 国家自然科学基金项目资助 (50276018, 50325621)

作者简介: 乔 瑜 (1977-), 男, 安徽安庆人, 华中科技大学博士研究生。

组成。通常的计算都是采用同一个详细的基元反应机理模型对上述三个区域求解，而 AdapChem 则根据预混区温度较低、碳氢组分的反应最为重要，火焰区温度最高，排烟区碳氢组分可以忽略，而氮组分的反应却是重要的特点，分别在三个区域采用不同的简化反应机理模型，就可以得到与详细机理模型同样精度的解，大大节省计算资源。在扩散火焰中，AdapChem 的优势更为突出。在这种火焰中，很大一部分的流场区域里可能没有发生重要的反应，通常的计算模型仍然将大量的计算机 CPU 时间和内存消耗于存储该区域所有组分的物性、浓度等，事实上这些组分在该区域的量少到可以忽略不计。而 AdapChem 则完全避免了这种资源的浪费。与此同时，AdapChem 在每个时间步长内的每个求解区域(或计算单元)里根据当地条件自动选择和采用不同的简化模型，保证求解精度与通常的所有区域全部采用详细机理模型的求解精度相当。这样一来，在节省大量计算资源的前提下，在实际燃烧过程及其污染物生成的计算模型研究中采用 AdapChem 就成为可能，以往受到的资源限制，将实际燃烧过程的流动、化学反应割裂开来的做法就可以避免；以往在所有计算区域采用同一种简化模型导致计算精度不高的情况就将得到根本的改变。

## 2 AdapChem 的算法

笛卡尔坐标系中，二维多组分动力学守恒方程如下：

$$\frac{\partial \vec{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial y} = L(\vec{Q}_v) +$$

$$\vec{S} + \vec{S}_r \tag{1}$$

其中： $\vec{Q}$ —质量、动量、能量和物质组分等相关变量； $\vec{E}$ 和 $\vec{F}$ —非粘性流动矢量； $\vec{Q}_v$ —粘性流动的相关变量。

$$\vec{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ e \\ \rho Y_i \end{pmatrix}, \quad \vec{Q}_v = \begin{pmatrix} p \\ u \\ v \\ T \\ Y_i \end{pmatrix},$$

$$\vec{S}_r = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ w_i \end{pmatrix}, \quad \vec{E} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(e + p) \\ \rho u Y_i \end{pmatrix},$$

$$\vec{F} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(e + p) \\ \rho v Y_i \end{pmatrix},$$

式中： $\vec{S}$ —浮力作用或对称性的流体动力学源项； $\vec{S}_r$ —化学源项。

稳态时，式(1)中的空间项和源项的瞬时值趋近零，目前采用随时间进程的方式来求取稳态解。预设守恒方程可以写成：

$$\Gamma \frac{\partial \vec{Q}_v}{\partial t} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial y} = L(\vec{Q}_v) + \vec{S} + \vec{E}_r \tag{2}$$

预设矩阵  $\Gamma$  是根据雅可比行列式  $\partial \vec{Q} / \partial \vec{Q}_v$  得到的，矩阵  $\Gamma$  可写成：

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \rho'_p & 0 & 0 & \rho_T & \rho_{Y_j} \\ u \rho'_p & \rho & 0 & u \rho_T & u \rho_{Y_j} \\ v \rho'_p & 0 & \rho & v \rho_T & v \rho_{Y_j} \\ H \rho'_p - (1 - \rho h_p) & \rho u & \rho v & \rho_T H + \rho h_T & H \rho_{Y_j} + \rho h_{Y_j} \\ Y_i \rho'_p & 0 & 0 & Y_i \rho_T & Y_i \rho_{Y_j} + \rho \end{bmatrix} \tag{3}$$

其中： $H$ —总焓； $\rho_T$ 和 $\rho_p$ —一定温度和压力下的相应密度值； $h_T$ 和 $h_p$ —一定温度和压力下的相应焓值。参数  $\rho'_p$  控制算法收敛速率的相关物理过程。

## 3 算法的实现

AdapChem 程序是在 Linux 和 Unix 操作系统下开发的，采用 Fortran77 和 C 语言混合编程。其源程序是由若干个各具功能的子程序组成的，涉及化学反应项的计算是调用 CHEMKIN-II<sup>[3]</sup> 进行的。根据要求，可以添加不同的子程序，丰富其数值模拟的范围和功能。图 1 给出了 AdapChem 程序的核心结构。当迭代达到收敛时，调用 CHEMKIN 进行化学项的计算。

## 4 结果

实际的研究表明：使用自适应化学理论来研究相关问题可以大大节省计算所需的时间。针对不同的算例，使用 AdapChem 将会节省大量的运算时间。运算时间节省的多少取决于计算精度的要求以及反应模型简化的相关经验和技巧。Schmer 等人曾经对包含 12 种组分、23 个基元反应的 H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> 火焰反应机理进行过研究<sup>[9]</sup>，详细反应机理被简化为 H<sub>2</sub>-rich 和 O<sub>2</sub>-rich 两个简化模型，如表 1 所示。对不同的算例，

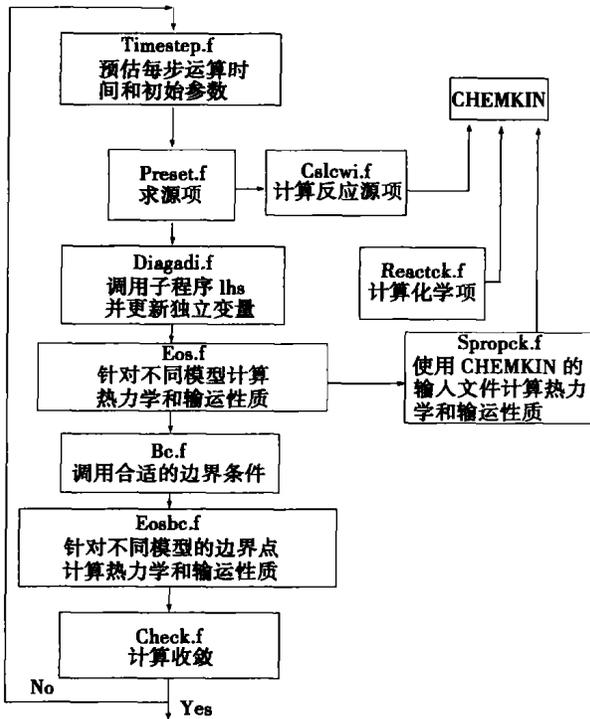


图 1 AdapChem 的核心结构

表 1 H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> 火焰详细及简化的化学反应机理

Reaction	H <sub>2</sub> -rich	O <sub>2</sub> -rich	Full
H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub> = 2OH			✓
OH + H <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> O + H	✓	✓	✓
O + OH = O <sub>2</sub> + H	✓	✓	✓
O + H <sub>2</sub> = OH + H	✓	✓	✓
H + O <sub>2</sub> + M = HO <sub>2</sub> + M	✓	✓	✓
OH + HO <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> O + O <sub>2</sub>	✓	✓	✓
H + HO <sub>2</sub> = 2OH	✓	✓	✓
O + HO <sub>2</sub> = O <sub>2</sub> + OH	✓	✓	✓
2OH = O + H <sub>2</sub> O	✓	✓	✓
H + H + M = H <sub>2</sub> + M	✓	✓	✓
H + H + H <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> + H <sub>2</sub>	✓	✓	✓
H + H + H <sub>2</sub> O = H <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> O	✓	✓	✓
H + OH + M = H <sub>2</sub> O + M	✓	✓	✓
H + O + M = OH + M	✓	✓	✓
O + O + M = O <sub>2</sub> + M	✓	✓	✓
H + HO <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub>	✓	✓	✓
HO <sub>2</sub> + HO <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + O <sub>2</sub>	✓	✓	✓
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + M = OH + OH + M	✓	✓	✓
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + H = HO <sub>2</sub> + H <sub>2</sub>	✓	✓	✓
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + OH = H <sub>2</sub> O + HO <sub>2</sub>	✓	✓	✓
O + N <sub>2</sub> = NO + N	✓	✓	✓
N + O <sub>2</sub> = NO + O	✓	✓	✓
OH + N = NO + H	✓	✓	✓

表 2 AdapChem 和 FullChem 每步所用的时间

	AdapChem 用时/ms·步 <sup>-1</sup>	FullChem 用时/ms·步 <sup>-1</sup>
算例 1	10 897	33 174
算例 2	13 183	33 924

在保证精度的前提下, AdapChem 起到了节省计算时间的作用, 结果见表 2。Lu Pisi 对更为复杂的 CH<sub>4</sub>/air 火焰的 GRI-Mech 反应机理进行过相关研究<sup>[7]</sup>。GRI-Mech 机理包含 35 种组分、217 个基元反应。结果表明: 越复杂的反应机理, 计算化学项所需的时间越长, 使用 AdapChem 的效率越明显<sup>[7]</sup>。

### 5 完善与发展

以往反应模型的简化多为人工进行, 没有统一规范的标准。而这个问题恰恰正是 AdapChem 的核心问题之一。以麻省理工学院 Lu Pisi 博士为首的科研小组近期在这方面进行了大量的工作, 为 AdapChem 在煤燃烧过程及其污染物生成的相关研究打下了坚实的基础。

AdapChem 经过近年的发展正日趋成熟, 但其本身仍有需要进一步完善的地方。以往的程序没有考虑辐射传热对整个系统的影响, 而在很多情况下, 这往往又

是不能忽略的重要因素。Hottel Zone 和 Monte Carlo 方法是两种被普遍接受的计算辐射传热的传统方法, 但由于其本身大量计算时间的要求以及研究散射问题的局限, 这两种方法很少应用于复杂燃烧模型<sup>[8~11]</sup>。相比而言, 另一种计算辐射传热的方法—离散坐标法<sup>[12~13]</sup> (Discrete Ordinates Method, 简称 DO 法) 不仅可以用于单纯的辐射传热研究, 而且可以非常方便的与其他计算程序结合, 这也是我们选择将其添加到 AdapChem 中去的重要原因。我们与葡萄牙里斯本高等技术学院 IST 合作, 将辐射的 DO 方法引进到 AdapChem 中, 图 2 所示为 AdapChem 中引入辐射 DO 法的原理图。图中, 求取吸收系数  $K_a$  精确解的工作由葡萄牙里斯本高等技术学院完成。作为第一步, 目前采用的是简单经验公式的求解。我们将其应用于 CH<sub>4</sub> 火焰的研究, 并与未考虑辐射因素的模拟结果进行了比较, 取得了较为合理的结果。图 3 所示为圆柱形燃烧器, CH<sub>4</sub> 和初始空气的混合气体入口半径为  $r_1$ , 整个圆柱

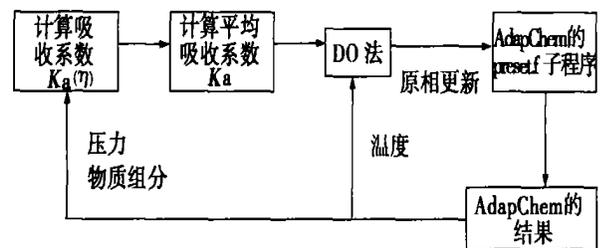


图 2 AdapChem 中引入辐射的流程图

表 3 CH<sub>4</sub>/空气火焰参数

	CH <sub>4</sub> 质量流速 $\dot{Q}_{CH_4}/\text{cm}^3 \cdot \text{min}^{-1}$	空气质量流速 $\dot{Q}_{air}/\text{cm}^3 \cdot \text{min}^{-1}$	流速 $V/\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$	CH <sub>4</sub> 体积 含量 $Y_{CH_4,B}$	O <sub>2</sub> 体积含 量 $Y_{O_2,B}$	N <sub>2</sub> 体积含 量 $Y_{N_2,B}$
火焰 1	330	1 050	23.71	0.148	0.240	0.613
火焰 2	330	420	12.89	0.302	0.196	0.501

形燃烧区域的半径为  $r_n$ , 燃烧器壁有一定厚度。表 3 给出了 2 种  $\text{CH}_4/\text{空气}$  火焰的各项参数<sup>[14]</sup>。

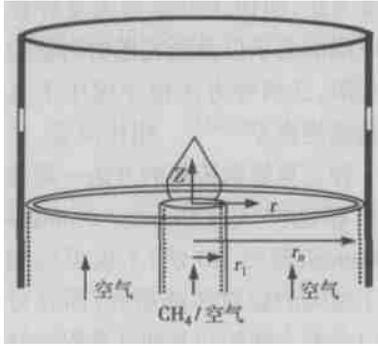


图 3 燃烧器结构

图 4 为 AdapChem 对火焰 1 模拟的部分结果, 由于矩形是对称图形, 我们只绘出了矩形截面的左边或右边区域的一部分。前四幅图依次表示温度、 $\text{CH}_4$ 、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{CO}$ 。其中, 从温度图中可以看出,  $\text{CH}_4$  燃烧是一个温度不断升高, 随后又逐渐降低、冷却的过程。温度最高的区域既不是  $\text{CH}_4$  富集的内焰区域(第二幅图所示), 也不是尾焰部分。高温区基本与  $\text{CO}_2$  的生成区域(第三幅图)一致。比较第三和第四幅图, 我们不难看出  $\text{CO}_2$  较  $\text{CO}$  后生成, 生成  $\text{CO}_2$  和  $\text{CO}$  的过程释放了大量的热量, 使区域内的温度剧烈升高。第五幅图则表示出整个矩形区域化学简化模型的选取, 图中的数字表示不同的简化模型编号。其中, 模型 0 表示的是包含 217 个基元反应的全面反应模型。在此区域, 系统反应较为复杂, 不宜采用简化的化学机理进行计算。从图中显而易见, 对整个区域调用全面反应模型进行计算是没有必要的。

图 5 是 AdapChem 对火焰 2 模拟的部分结果, 我们仍然只绘出了矩形截面的左边或右边区域的一部分。与图 4 相同, 五幅图

依次表示温度、 $\text{CH}_4$ 、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{CO}$  和模拟中调用的简化模型。对 2 种火焰及其 AdapChem 的模拟结果的深入比较, 我们不难发现: 火焰 2 的高温区域较火焰 1 有向尾焰延伸的趋势(第一幅图), 这是由于初始混合燃烧气体中  $\text{O}_2$  不足,  $\text{CH}_4$  的充分燃烧被抑制到尾焰区域。表 3 中, 火焰 2 的混合气体中  $\text{CH}_4$  的绝对含量相同, 空气的绝对含量较火焰 1 少, 使得火焰 2 中  $\text{CH}_4$  相对含量较多, 混合燃烧气体的总量较少, 流速较慢。由于两种火焰的  $\text{CH}_4/\text{O}_2$  的初始体积比都大于 1:2,  $\text{CH}_4$  的充分燃烧都需要二次风提供多余的  $\text{O}_2$ (如图 5 所示)。这种高温区延伸的趋势由于火焰 2 中  $\text{CH}_4$  的相对含量更高, 而更加显著。显然 AdapChem 的模拟结果与这些特征是一致的。由于同样的原因, 图 5 中的  $\text{CO}_2$  和  $\text{CO}$  的生成不同程度的有向尾焰区域延伸的趋势(第三、第四幅图)。由于流速较慢,  $\text{CH}_4$  主要集中于燃烧器出口附近(第二幅图)。由于以上这两方面因素的影响, 火焰 2 中调用全面反应模型的区域更大一些, 向下更接近燃烧器出口, 向上向尾焰区域

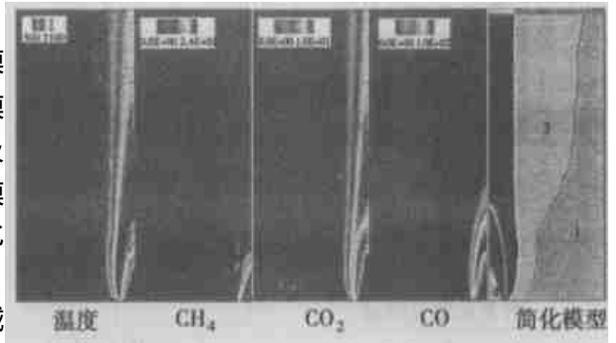


图 4 AdapChem 对火焰 1 的部分模拟结果

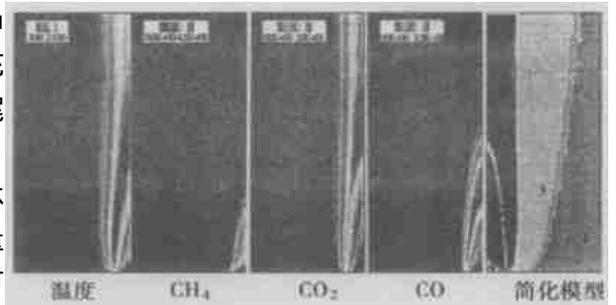


图 5 AdapChem 对火焰 2 的部分模拟结果

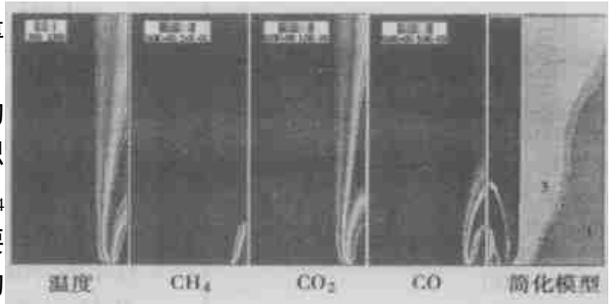


图 6 未加入辐射模型的 AdapChem 对火焰 1 的部分模拟结果

延伸。

图 6 为未考虑辐射因素的 AdapChem 对火焰 1 模拟的部分结果。图 6 与图 4 的比较可知, 引入辐射模型 DO 法前后, 各类模拟结果从图形上没有明显的变化, 但第一幅图中的最高温度值是由图 4 中 2 048 K 升高为图 6 中的 2 186 K。由此可见, 引入辐射模型以后, 模拟的温度值有一定的降低, 这是一个完全合理的结果。这是因为: 未考虑辐射因

素以前, 系统被假定为一个理想的绝热体系, 与外界没有任何的热量交换和能量损失。

## 6 结 论

自适应化学理论为我们提供了一种涉及复杂反应经济而又精确的数值求解方法。使用离散坐标法, 引入以往没有考虑过的辐射模型是有必要的。针对  $\text{CH}_4$ /空气火焰的模拟也取得了较为理想的结果。当然, AdapChem 本身还有需要进一步完善的地方。下一步工作将着眼于修正吸收系数  $K_a$  的精确求解, 并将自适应化学理论应用到更为复杂的痕量元素机理的数值研究。

## 参考文献:

[1] GREEN W H, SCHWER D A. Computational fluid and solid mechanics [M]. Bathe K J Editor, Elsevier Science Ltd, 2001: 1209—1212.

[2] SUSNOW R G, DEAN A M, GREEN W H. Rate-based Construction of complex kinetic models [J]. **Journal of Physical Chemistry A**, 1997, **101**: 3731—3740.

[3] POPE S B. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation [J]. **Combust Theory and Modeling**, 1997, **1**: 41—63.

[4] TONSE S R. An economical strategy for chemical kinetics [J]. **Israeli Journal of Chemistry**, 1999, **39**(1): 97—106.

[5] KEE R J, RUPLEY F M, MILLER J A. Chemkin II: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics [R]. San Diego: Sandia National Laboratories, SAND89—8009, 1989.

[6] SCHWER D A, LU PISI, GREEN W H. Adaptive chemistry approach to modeling complex kinetics in reacting flows [J]. **Combustion and Flame**, 2003, **33**: 451—465.

[7] LU PISI. Adaptive chemistry approach to modeling complex kinetics in reactive flow [D]. PHD thesis, Lisbon: Instituto Superior Técnico, Portugal, 2002.

[8] HOTTEL H C, SAROFIM A F. Radiative transfer [M]. New York: McGraw-Hill, 1967.

[9] HOTTEL H C, COHEN E S. Radiant heat exchange in a gas-filled enclosure: Allowance for nonuniformity of gas temperature [J]. **AIChE Journal**, 1958, **4**(1): 3—14.

[10] SEGEL R, HOWELL J R. Thermal radiation heat transfer [M]. New York: McGraw-Hill, 1981.

[11] TANIGUCHI H. The radiative heat transfer of gas in a three-dimensional system calculation by Monte Carlo Method [J]. **Bull JSME**, 1969, **12**: 67—78.

[12] FIVELAND W A. Discrete-Ordinate solutions of the radiative transport equation for rectangular enclosures [J]. **Journal of Heat Transfer**, 1984, **106**: 699—706.

[13] JAMALUDDIN A S, SMITH P J. Predicting radiative transfer in rectangular enclosures using the discrete ordinates method [J]. **Combust Sci and Tech**, 1988, **59**: 321—340.

[14] 乔瑜, 徐明厚, LU PISI, 等. 基于自适应化学理论的复杂  $\text{CH}_4$  燃烧模拟 [J]. **中国电机工程学报**, 2004, **24**(2): 181—184.

·新技术新产品·

## GE 公司的航改型燃气轮机

据《Diesel & Gas Turbine Worldwide》2003 年 4 月号报道 GE LM 系列航改型燃气轮机达到一个新的里程碑, LM 系列中最引人注目的 LM2500、LM2500+ 和 LM6000 已在世界范围包括电力生产、机械驱动和船舶推进的几个领域获得更多的订单。LM 机在世界上已有 2700 多台发动机投入运行, 运行时间累计超过 5300 万小时。在 LM 系列中, LM2500 是最受人欢迎的机型, 生产的 733 台 LM2500 型用于工业, 1119 台 LM2500 型用于舰船上。

GE 提供 2.0~50 MW 功率范围的航改型燃气轮机。这些发动机在船舶领域应用范围从商用高速渡船和旅游船到军用巡逻艇、护卫舰、驱逐舰和航空母舰。

GE 于 2002 年 2 月宣布, LM2500 燃气轮机和主减速齿轮传动装置已被选用于意大利海军新的 Andrea Doria 航空母舰。4 台 LM2500 发动机将以 COGAG (燃燃并车使用联合装置) 的配置用于该航空母舰, 两个齿轮装置中的每一个将由两台 LM2500 驱动, 并且将提供 44 700 kW 输出功率。右舷和左舷的发动机舱具有类似的配置。

(吉桂明 供稿)

复杂反应流自适应化学理论计算的研究现状 = **The Present Status of Research on an Adaptive Chemistry (AdapChem) Concept for Calculating Complex Reaction Flows** [刊, 汉] / QIAO Yu, XU Ming-hou (National Key Laboratory of Coal Combustion under the Huazhong University of Science & Technology, Wuhan, China, Post Code: 430074), Pisi Lu (Department of Chemical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, 77 Massachusetts Ave., Cambridge, MA 02139), // *Journal of Engineering for Thermal Energy & Power*. — 2004, 19(4). — 331~335.

Professor Green of the Department of Chemical Engineering under the Massachusetts Institute of Technology has proposed an adaptive chemistry (AdapChem) concept, under which by the use of a consistent splitting method conservation equations can be divided into two organic parts, namely, a chemical equation and a flow equation. Depending on different reaction conditions, the above method makes it possible to perform in-domain numerical simulations of non-complex detailed and elementary reaction models by using a multitude of simplified chemical reaction models. As a result, an effective approach is provided for avoiding the loss of efficiency under the condition of retaining chemical precision. However, to further improve AdapChem, it is necessary to introduce a radiation model, which has not been taken into account previously. In this connection, the authors have employed a discrete coordinate method. The simulation results of a CH<sub>4</sub>/air flame have shown that with the radiation model being incorporated the graphical expression of calculation results did not undergo significant changes and there was also a rational reduction in temperatures. **Key words:** adaptive chemistry, consistent splitting method, simplified model, discrete coordinate method.

循环流化床燃烧技术的研究展望 = **Prospective Research Progress of Combustion Technology for Circulating Fluidized Beds** [刊, 汉] / YU Long (Harbin Boiler Works Co. Ltd., Harbin, China, Post Code: 150040), LU Jun-fu, YUE Guang-xi (Department of Thermal Engineering, Tsinghua University, Beijing, China, Post Code: 100084), WANG Zhi-wei (National Thermal Power Research Institute, Xi'an, China, Post Code: 710032) // *Journal of Engineering for Thermal Energy & Power*. — 2004, 19(4). — 336~342.

Some major issues currently receiving focused attention are addressed, which are mainly concerned with the further development of circulating fluidized-bed combustion technology. They include: combustion efficiency achievable when burning various ranks of coal, water circulation during operations with supercritical parameters, the diffusion of particles and gases in gas-solid dual-phase flows under the condition of large bed sections, emissions of NO<sub>x</sub> and SO<sub>2</sub> and their control, flow problems near side-wall zones, etc. **Key words:** circulating fluidized bed, boiler, prospective research progress.

应用全息谱技术诊断热变形不均匀引起的振动故障 = **Vibration Failures Due to the Non-uniform Thermal Deformation Diagnosed by the Use of Hologram Spectral Techniques** [刊, 汉] / LIU Shi, QU Liang-sheng (Intelligent Instrumentation and Monitoring-diagnosis Research Institute under the Xi'an Jiaotong University, Xi'an, China, Post Code: 710049) // *Journal of Engineering for Thermal Energy & Power*. — 2004, 19(4). — 343~346.

When a traditional method based on FFT (Fast Fourier Transformation) frequency spectrum analysis is used, it is very difficult to effectively differentiate between the thermal effects-induced serious vibration problems and rotor loss-of-balance failures occurring in a turbogenerator. With the help of a rotor model built by the authors the difference between the above two types of problem and failure is analyzed from a theoretical viewpoint. Meanwhile, these failures were identified and differentiated by making use of hologram differential spectrum technology and an initial-phase point analysis method. Specific cases in engineering applications have verified the effectiveness of the above-mentioned method. **Key words:** vibration, failure diagnosis, hologram differential spectrum.

超临界汽轮机再热第一级叶片固粒冲蚀特性的数值分析 = **Numerical Analysis of the Erosion Characteristics of Solid Particles in the First Reheat Stage Blades of a Supercritical Steam Turbine** [刊, 汉] / DAI Liping, YU Mao-zheng, WANG Xian-gang, et al (National Key Laboratory of Multi-phase Flows in Power Engineering under the Xi'an Jiaotong University, Xi'an, China, Post Code: 710049) // *Journal of Engineering for Thermal Energy & Power*. — 2004, 19(4). — 347~350.

The three-dimensional motion characteristics of solid particles in the first reheat stage of a supercritical steam turbine were