

化工计算传质学

Computational Mass Transfer
in Chemical Engineering

余国琮 袁希钢 著



化学工业出版社

Computational Mass Transfer
in Chemical Engineering

化工计算传质学

余国琮 袁希钢 著



化学工业出版社

· 北京 ·

本书系统介绍了针对化工气液传质过程的计算传质学。前7章主要介绍化工过程传质计算,内容包括基本微分方程组数学模型以及用数值计算求取设备内浓度场及有关传质、传热及流动参数的方法;计算传质学在精馏、化学吸收、吸附、固定床催化反应与流态化过程的应用及计算实例;多组分传质的计算,包括传质系数及平衡组成。第8、第9章介绍化工界面传质计算,内容包括传质过程中的 Marangoni 效应、Rayleigh 效应等界面效应,以及采用格子-Boltzmann 方法在气液界面传质过程的模拟等。书后附录了与计算传质学相关的计算流体力学和计算传热学的基础知识以及一些经验关联式。

本书可作为高等院校化学工程专业研究生的教学参考书,也可为化工科技人员进一步开展计算传质学的研究和应用提供参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

化工计算传质学/余国琮,袁希钢著. —北京:
化学工业出版社, 2017. 1
ISBN 978-7-122-28461-7

I. ①化… II. ①余… ②袁… III. ①化工计算-传
质学-研究 IV. ①TQ015

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 265311 号

责任编辑:傅聪智 陈 丽
责任校对:陈 静

文字编辑:王 琪
装帧设计:刘丽华

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)
印 装:北京瑞禾彩色印刷有限公司
787mm×1092mm 1/16 印张27½ 字数616千字 2016年12月北京第1版第1次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899
网 址: <http://www.cip.com.cn>
凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价:180.00 元

版权所有 违者必究

前 言

随着计算机与计算技术的进步以及由此而发展出的数值计算,先后又与工程学科、基础学科乃至人文学科等多种学科交叉融合,已成功建立了一些新的学科,如计算力学、计算化学、计算物理学、计算生物学等。可见数值计算与理论研究以及实验探索已经成为研究科学与技术问题的三个基本方法,同时数值计算也成为解决实际问题的一个重要手段。

在 20 世纪 70 年代,数值计算与流体力学相结合开创性地发展出计算流体力学 (computational fluid dynamics),随后又与传热相结合发展出计算传热量 (computational heat transfer)。通过这两个学术领域中的数值计算,能够预测在各种情况下流动和传热过程中的状态和有关参数信息,因此在包括化学工程在内的广阔工程领域中得到了广泛应用,获得了显著效果,解决了一些过去无法解决的难题,如预测设备内的流速场和温度场等。

但在化学工程学科中,由于一般化工过程的主要目标是物质的转化,特别是其中的传质和化学反应,它不仅需要知道有关流体流动及传热过程的情况,更需要了解过程局部及整体的传质和化学反应状态及有关参数方面的全部信息,因为这些信息是预测化工设备效能以及优化设计或对设备评估改进所不可缺少的重要依据,特别是对表征主要传质状态的浓度场 (浓度分布) 尤为重要。然而浓度场的计算与预测目前只有两种方法:一种方法是假设湍流施密特数 (Sc_t) 或湍流佩克莱数 (Pe_t) 为一个常数,并结合计算流体力学模拟结果来计算;另一种方法是采用通过惰性示踪剂在小型或类似的实验中得到的有关经验关联式来计算。但这些方法在理论上和实践上都被证明是不可靠的,甚至有相当大的误差,因此寻求可靠的计算与预测传质状态的方法,包括设备内的浓度场以及有关传质过程的重要参数 (如湍流传质扩散系数等),就成为化工学者亟待解决的问题。

然而化工传质过程常常是多相、多组分、非理想、非恒温、非平衡、非稳态的复杂过程,影响传质设备效能的因素很多,除流速、温度和浓度分布外,还有界面效应、多组分效应、结构、尺度效应等许多方面,而且彼此相互作用,这使预测传质设备内浓度场、未知的传质参数以及局部和整体传质效率的准确数学模拟与计算更为复杂,需要采用数值方法才有可能解决。为此而发展出的数值计算与传质过程理论相结合并与相关学科交叉的计算传质学 (computational mass transfer),就自然成为需要进行探索的一个新领域。

计算传质学是研究通过数值计算来预测传质过程及设备内与传质有关的全部信息的理

论和方法,包括预测浓度场、局部与整体的传递参数、界面效应、传质效率以及同时获得的流速场、温度场等方面的信息,从而能够定量描述传质过程的全面状态与评估过程的完善程度。

计算传质学中需要解决的关键问题之一是对传质微分方程的封闭,并且在此基础上与计算流体力学和计算传热学的方程相结合,从而建立对传质过程中的动量、质量和热量传递现象严格模拟的计算传递体系。在此基础上可以求解在传质、传热、传质和化学反应耦合条件下化工设备中的浓度场,同时也能得到流速场、温度场、压力场和有关的传递参数的分布以及界面传递、多组分系统、设备结构及尺度等效应的影响。根据这些结果就能更准确地进行优化设计或对现有设备进行评估,以发现设备的薄弱环节并加以改进。因此对计算传质学的探索,不但可提高化工传质过程数学模拟的水平,还能据此提高传质效能和进一步了解过程传递的实质。此外,还有助于将实验室结果直接模拟放大到工业传质设备。从广义观点来说,计算传质学可应用于含有传质的所有过程,而不只限于化工过程。由此可见,开拓发展计算传质学具有理论和现实意义。

化学工程学科经过近百年的发展,先后经过了以“单元操作”为标志的第一里程,以及以“三传一反”(动量传递、热量传递、质量传递和化学反应工程)为标志的第二里程。化学工程学科发展的第三里程目前还未有定论,但化学工程与数值计算技术及相关学科交叉融合并向多尺度方向发展(包括微观尺度、介观尺度、宏观尺度以及大宏观尺度),从而形成的“计算化学工程”,无疑将会是第三里程中的主要发展内容之一,而化工计算传质学将是其中一个重要的组成部分。

有鉴于此,近年来我们和所指导的一些研究生开展了计算传质学的初期研究工作,主要是探讨传质方程的封闭、计算传质学在化工过程中的应用以及界面效应对传质的影响,以期初步建立化工计算传质学的框架。本书是上述研究工作的部分介绍。

化工计算传质学目前包含化工过程传质计算与界面传质计算两个方面,二者既有联系,但探讨重点又各不相同。一方面,化工过程传质计算主要是探讨各类化工过程和设备中的浓度分布以及速度、温度、压力和有关参数的局部与整体状态的预测,并且考察多组分系统、设备结构与尺度大小等因素对传质效率的影响,从而能使设备设计最优化或者提出提高现有传质效率的方案;另一方面是界面传质计算,主要探讨界面效应对传质过程的影响及传质过程的机理,从而进一步理解传质现象,以期改进传统的传质理论及寻求提高传质效率的根本途径。

本书内容只论及化学工程中气液传质过程的化工计算传质学。第1章给出计算传质学的基本方程;第2、第3、第4、第5、第6章分别介绍计算传质学在精馏、化学吸收、吸附、固定床催化反应与流态化过程的应用举例;第7章介绍多组分传质的计算,包括传质系数及平衡组成;第8、第9章分别讨论传质过程中的界面效应,包括 Marangoni 效应、Rayleigh 效应以及采用格子-Boltzmann 方法在界面传质的模拟。书中附录Ⅰ和附录Ⅱ分别扼要叙述计算流体力学和计算传热学的基础,作为计算传质学的相关知识;附录Ⅲ、附录Ⅳ和附录Ⅴ分别给出了文献中较为常用的填料塔的传质系数、有效传质面积以及持液量的有关关联式;关于用于格子-Boltzmann 方法的粒子平衡态分布函数的推导及其与 Navier-Stokes 方程之间的关系分别由附录Ⅵ和附录Ⅶ给出。

由于我们开展此项研究工作的时间较短，离发展化工计算传质学的目标还很远，故本书只涉及计算传质学的基础。书中除附录Ⅰ、附录Ⅱ内容为介绍必要的预备知识外，其余内容均取自我们近年来指导的一些研究生科研工作及共同在学术刊物上发表的论文。因此本书可以说是我们和有关研究生们的集体之作。

编写本书的目的有二：其一是作为化学工程专业研究生课程“化工计算传质学”的参考书；其二是为今后研究生及有关人员进一步开展化工计算传质学的研究和应用提供参考。

本书的研究工作是在天津大学化学工程研究所及化学工程联合国家重点实验室（天津大学）进行，并且得到国家自然科学基金重点项目 20136010 及 20736005 的资助。本书的编写还得到天津大学化学工程研究所的大力支持以及研究生们对编写工作的协助，对此我们表示衷心的感谢。

希望读者对本书提出批评和指正。

余国琮
天津大学教授
中国科学院院士

袁希钢
天津大学教授

2016 年 6 月

目 录

引言

第1章 计算传质学基本方程	5
1.1 质量守恒方程及其封闭	5
1.2 传统的求解湍流传质扩散系数方法	6
1.2.1 特征数法	7
1.2.2 实验测定法 (惰性示踪剂法)	7
1.3 质量守恒方程封闭的两方程模型 ($\overline{c'^2}$ - ϵ_c 模型)	9
1.3.1 两方程模型 ($\overline{c'^2}$ - ϵ_c 模型) 的导出	9
1.3.2 近壁区计算	19
1.4 质量守恒方程封闭的雷诺质流 $\overline{u_i c'}$ 模型	20
1.4.1 标准雷诺质流模型	20
1.4.2 混合雷诺质流模型	22
1.4.3 代数雷诺质流模型	23
1.4.4 雷诺质流对过程传质的影响	23
1.4.5 各向异性的扩散系数	24
1.5 计算传质学的数学方程体系	24
1.5.1 数学模型方程组	25
1.5.2 数学模型方程体系的统一	27
1.6 湍流传递扩散系数的关系	29
1.7 边界条件的确定	30
1.7.1 入口边界条件	30
1.7.2 出口边界条件	32
1.7.3 塔壁边界条件	32
1.8 模型的验证	32
1.9 气液两相流模拟方法	35
1.9.1 两相流模型	35
1.9.2 在气相相互作用下的单液相流体方法	36

1.9.3 气液混合流模型	37
符号说明	38
参考文献	38
第2章 计算传质学的应用(一)——精馏过程	41
2.1 板式塔的模拟	42
2.1.1 板式塔传质扩散特征数模型	42
2.1.2 板式塔传质扩散 c'^2 - ϵ_c 两方程模型	46
2.1.3 板式塔传质扩散雷诺质流模型	52
2.1.4 多组分点效率的预测	59
2.2 填料塔的模拟	67
2.2.1 填料塔湍流传质扩散 c'^2 - ϵ_c 模型	67
2.2.2 填料塔雷诺质流模型	74
2.3 总结	80
符号说明	81
参考文献	81
第3章 计算传质学的应用(二)——化学吸收过程	84
3.1 化学吸收过程 c'^2 - ϵ_c 两方程数学模型	85
3.1.1 模型方程	85
3.1.2 CO ₂ 的 MEA 水溶液化学吸收过程模拟及验证	88
3.1.3 CO ₂ 的 AMP 水溶液化学吸收过程模拟及验证	99
3.1.4 CO ₂ 的 NaOH 水溶液化学吸收过程模拟及验证	104
3.2 化学吸收过程雷诺质流模型	110
3.2.1 液相相互作用数学模型	110
3.2.2 CO ₂ 的 MEA 水溶液吸收过程模拟及验证	112
3.2.3 CO ₂ 的 NaOH 水溶液化学吸收过程模拟及验证	117
3.3 总结	120
符号说明	121
参考文献	121
第4章 计算传质学的应用(三)——吸附过程	124
4.1 吸附过程 c'^2 - ϵ_c 双方程数学模型	124
4.1.1 模型方程	124
4.1.2 模型计算策略	130
4.1.3 模拟结果与实验的验证	130
4.2 吸附过程传质雷诺质流模型	136
4.2.1 模型方程	137

4.2.2 模拟结果与验证	138
4.2.3 解吸(再生)过程的模拟与验证	142
4.3 总结	143
符号说明	144
参考文献	145
第5章 计算传质学的应用(四)——固定床催化反应	147
5.1 模拟对象: 壁冷式固定床催化反应器	148
5.2 数学模型	149
5.2.1 $\overline{c}^{1/2}-\epsilon_c$ 两方程模型	149
5.2.2 源项的确定	152
5.2.3 边界条件	152
5.2.4 模拟结果与实验结果的比较	153
5.3 用于催化反应器模拟的雷诺质流模型	160
5.3.1 模型方程	160
5.3.2 模拟结果及验证	162
5.3.3 各向异性扩散系数	164
5.4 总结	166
符号说明	166
参考文献	168
第6章 计算传质学的应用(五)——流态化床反应过程	170
6.1 流态化床的流动特性	170
6.2 $\overline{c}^2-\epsilon_c$ 两方程模拟流态化过程	173
6.2.1 在固定流态化床反应器中除去废气中的 CO_2	173
6.2.2 在 CFB 反应器上行床中臭氧分解的模拟	181
6.2.3 在 CFB 反应器下行床中臭氧分解的模拟	183
6.3 雷诺质流模型	186
6.3.1 CFB 反应器上行床中臭氧分解的模拟	190
6.3.2 CFB 反应器下行床中臭氧分解的模拟	197
6.4 总结	199
符号说明	200
参考文献	201
第7章 传质理论及多组分系统的传质	203
7.1 早期经典的传质理论	203
7.1.1 双膜理论	204
7.1.2 渗透理论	205

7.1.3 表面更新理论	205
7.1.4 经典传质理论的发展	206
7.2 近界面的传质理论	207
7.2.1 湍流扩散传质理论	207
7.2.2 旋涡传质理论	208
7.3 基于界面状态的传质理论	209
7.3.1 界面效应理论	209
7.3.2 界面阻力理论	210
7.4 两组分体系传质系数的估算	211
7.5 气液相间平衡成分的估算	215
7.5.1 非理想溶液的热力学关系	215
7.5.2 过量(剩余)自由能	216
7.5.3 活度系数估算的半经验方程法	217
7.5.4 活度系数估算的基团贡献法	220
7.5.5 活度系数的实验测量	222
7.6 多组分系统的质量传递方程	226
7.6.1 普遍化的 Fick 定律	226
7.6.2 普遍化的 Maxwell-Stefan 方程	227
7.7 多组分质量传递方程的求解	229
7.7.1 与膜理论相结合的 Maxwell-Stefan 方程解法	229
7.7.2 结合渗透理论的 Maxwell-Stefan 方程解法	234
7.8 多组分质量传递方程的应用示例——精馏塔塔板上传质点效率的计算	241
7.8.1 Oldershaw 塔板上的点效率模型	243
7.8.2 Oldershaw 塔板上的点效率计算	247
7.8.3 组分交相互作用现象	259
符号说明	260
参考文献	261

第8章 气液传质过程的界面效应

8.1 Marangoni 对流现象的实验观测	269
8.1.1 传质界面为水平及液体静止情况下的结构	271
8.1.2 传质界面为水平及液体流动情况下的结构	275
8.1.3 传质界面为垂直(降膜)及液体流动情况下的结构	276
8.1.4 化学吸收界面的结构	277
8.2 Marangoni 对流的分析	280
8.3 产生 Marangoni 对流的数学模拟	281
8.3.1 数学模型	281
8.3.2 过程稳定性分析及失稳的临界马兰高尼数	283
8.4 气液界面 Marangoni 效应强化传质的理论分析	286

8.5	气液界面 Marangoni 效应的传质增强实验	289
8.5.1	界面为静止水平的传质增强实验	289
8.5.2	界面为垂直流动 (降膜) 的传质增强实验	291
8.6	从界面有序到无序的过渡	293
8.7	考虑 Marangoni 效应的传质理论	296
8.8	Rayleigh 对流的数学模拟	300
8.8.1	数学模型	300
8.8.2	模拟求解结果及分析	303
8.9	Rayleigh 对流的测量	310
8.10	气液界面上二维浓度分布的模拟与观测	312
8.10.1	界面上二维平面状态的模拟	312
8.10.2	界面浓度梯度的观测	315
8.11	在可变形界面同时进行传质与传热的 Marangoni 效应	317
8.11.1	模拟方程	317
8.11.2	扰动方程	318
8.11.3	界面变形的影响	318
8.11.4	边界条件	319
8.11.5	方程及其边界条件的无量纲化	321
8.11.6	稳定性分析	322
8.11.7	计算结果	323
8.12	气液传质界面效应的产生过程	325
	符号说明	326
	参考文献	327
第9章	格子-Boltzmann 方法对气液界面传质过程的模拟	329
9.1	格子-Boltzmann 方法简介	329
9.1.1	从格子-气方法到格子-Boltzmann 方法	329
9.1.2	格子-Boltzmann 方法基本方程	330
9.1.3	格子模型	331
9.1.4	边界条件	333
9.1.5	计算步骤	334
9.1.6	有外力影响的格子-Boltzmann 方程	335
9.1.7	传热过程的格子-Boltzmann 方法	336
9.1.8	传质过程的格子-Boltzmann 方法	338
9.1.9	格子模型计算与实际对象的关系	338
9.1.10	格子-Boltzmann 方法的应用	339
9.2	溶质从界面向主体扩散的格子-Boltzmann 模拟	339
9.2.1	数学模型	340
9.2.2	界面上单个溶质高浓度点的扩散过程	340

9.2.3	系统物性对界面溶质扩散的影响	343
9.2.4	界面上均布的多个溶质高浓度点的扩散过程	346
9.2.5	界面上非均布的多个溶质高浓度点的扩散过程	348
9.2.6	界面上随机的溶质高浓度点的扩散过程	350
符号说明		362
参考文献		363

附录		365
----	-------	-----

附录 I	计算流体力学基础	365
附录 II	计算传热学基础	382
附录 III	填料塔内传质系数和传质表面积的经验关联式	391
附录 IV	传质系数模型数据库	398
附录 V	散堆填料塔内气液两相逆流操作总持液量的关联式	419
附录 VI	平衡分布函数离散方程的推导	421
附录 VII	格子-Boltzmann 模型导出 Navier-Stokes 方程	425

引 言

化工生产中的传质分离过程，如精馏、吸收、吸附、萃取、结晶等以及各种化学或生物反应过程，多数是传质与流体流动及传热耦合在一起进行的，而且这些过程一般比较复杂，如包含多相、多组分、湍流流动，伴有热效应、化学反应以及非稳态、非平衡等。对于这些复杂的传质过程，传统的研究方法主要是先建立简单的数学模型，例如将三维的流动、传热及传质过程简化为一维等，然后依靠实验手段获得有关模型参数，或者根据实验室的实测数据进行特征数关联，得到经验或半经验模型，用以指导工业设计。这种方法缺乏对过程本质的探究，等于用简化理论去解释复杂的现象。这种简化模型或经验关联通常只适用于特定或与特定相似的情况。当条件发生变化时，其计算结果与实际会有严重的误差。尤其是根据实验室数据来设计大型工业装备时，更经常导致失误，与预期的生产实际不相符合，这种情况常被认为是由于存在设备的“放大效应”或“尺度效应”而造成的。为此通常必须通过中间实验，甚至逐级放大，来实现从实验室结果到产业化的漫长过程。这就导致过程开发成本昂贵和速度缓慢。此外，在设计过程中为了避免经验公式或中间实验带来的偏差和不确定性，常还需要采取较大的安全系数来进行弥补。这就使设备成本、能量消耗等费用增加。可见对传质设备的优化设计是降低成本和节能的有效手段。为了改变这种情况，就需要对传质过程的基础及其准确模拟方法进行探讨。

20 世纪 60 年代以前，在科学研究中存在着两种相对独立的方法：理论研究和实验探索。随着计算机技术和数值计算方法的发展，使科学问题的解决多了一种选择，即数值计算的方法，而且数值计算使理论与实验之间有了更好的沟通。以计算机技术和正确数学模型为基础的数值计算已经成为继理论和实验之后的第三种科学研究方法。

数值计算相对理论研究和实验探索有下列一些优点。

① 成本低 在大多数实际应用中，模型开发和计算机运算的成本要远低于相应的实验研究的成本。

② 速度快 与实验研究相比，能在很短的时间内给出多种不同的方案，从中选择最优的设计，从而缩短工艺和产品的开发周期。

③ 能够解决理论求解的困难 根据理论建立的数学方程往往是一个方程组，包括多个非线性方程和多个参数，而且常常是三维的，因而数学求解很困难，甚至无法求解。而采用数值计算方法可以解决这个难题。

④ 给出完整的信息 能提供在整个计算域内所有有关变量在设备内的分布（如速度、压力、温度、浓度以及传递扩散系数等），从而可指导设备、工艺的优化和改进。而实验研究显然难以全部测出整个计算域的所有变量的分布，而且在这些信息中有许多是很难用实验方法得到的。

但也必须指出,正确的计算机模拟结果是建立在正确的数学模型以及边界条件基础上的。模拟结果还要经过多种不同的实验以及工业规模设备实测的验证才能实际应用。

计算机技术与传统学科的结合已经产生了许多新的交叉学科,如计算力学、计算化学、计算物理学、计算生物学等。这些新学科中又产生了一些分支,其中计算流体力学(computational fluid dynamics)是计算机技术与流体力学结合的产物,而且在20世纪70年代以后已经迅速发展成为现代流体力学的重要基础,渗透到许多相关学科和工程应用之中。随后以计算流体力学为基础,又与传热学相结合产生了计算传热学(computational heat transfer)。

经过多年的研究发展,计算流体力学以及计算传热学在理论、模型上已经取得了重要的研究成果,并且成功应用到过程工程涉及的速度场、温度场的预测以及工业设备设计。这为化工过程中有关流体流动、传热的计算模拟预测提供了坚实的理论及技术基础。

然而,质量传递是过程工业,尤其是化学工业中分离和反应操作中最基本的过程,常常从根本上决定着一个装置乃至一个系统的生产效率及其相关的经济指标。因此质量传递的准确预测与传质设备的优化设计是化学工程学科中的一个重要内容。

鉴于传质过程的重要性,如何将现代计算科学技术应用于传质过程的准确预测及设备放大,以期节省投资、减少能耗以及提高生产效率等,是化学工程的一个亟待解决的重要研究课题。在这种背景下,近年来计算传质学(computational mass transfer)的研究应运而生。

计算传质学的研究包括探索传质微分方程的封闭求解、界面对传质的影响以及设备传质效率的预测等方面。它是传质过程的合理模拟和探索传质机理的基础。它的特点是将传质学、流体力学、传热学和设备结构等因素综合考虑,从而能够同时求出浓度场、流速场、温度场、界面效应和有关传质参数,以实现工业传质设备的精确模拟,以期达到优化设备设计、省却中间放大过程、缩短开发周期、节省成本和节能的目的,同时可作为评估现有传质设备效能的基础。

由此可见,采用计算传质学模拟传质过程要考虑的因素很多,除应包括传质组分的质量守恒微分方程外,还要包括与流速有关的动量守恒和与温度有关的能量守恒的微分方程,即要建立整个传递过程的微分方程组。而这些方程都是不封闭的,因此还要添加相应的辅助方程来分别封闭。这样就形成了庞大的微分方程组,需要用数值方法来求解。因此计算传质学不仅与传质学有关,还需要和计算流体力学、计算传热学、物理、化学、计算数学等学科交叉,因而是一个复杂的模拟与计算过程。

在计算传质学中,对传质系数的估计很重要。由于质量是通过界面从一个相传递到另一个相,而界面传质理论目前还不成熟,故传质系数的估计通常仍用经验关联。因此两组分和多组分的传质理论亦成为计算传质学需要探索的问题。同时由于界面失稳而产生的界面及近界面的对流效应也影响到传质速率,在某种情况下能够有增强作用,故也是计算传质学涉及的问题。

一方面,计算传质学中过程计算的开展是采用 $\overline{c'^2}-\epsilon_c'$ 两方程模型来封闭传质微分方程以求取浓度分布(浓度场),并成功地应用于一些化工过程,包括精馏、化学吸收、催化反应、吸附等,随后亦发展了雷诺质流 $\overline{u'ic'}$ 方程模型的封闭模式和应用,从而初步建立计

算传质学的过程计算框架。另一方面,传质是要通过界面进行的,理论和实验都表明,界面效应影响到传质效率,因而界面计算也是计算传质的组成部分。因此,计算传质学目前包含两个内容,即过程计算和界面计算。

① 过程计算 它探讨预测各类传质过程中的局部与整体的传质状态以及设备结构对传质效率的影响。

② 界面计算 它探讨预测界面效应对传质过程的影响,从而进一步理解界面传质机理与界面传质通量的计算,以期改进传统的传质理论。

计算传质学目前尚处于起步阶段,今后还要继续探索与发展,使其逐步接近完善。

本书内容只论及化学工程中气液传质过程的化工计算传质学。第1章给出计算传质学的基本方程;第2、3、4、5、6章分别介绍计算传质学在精馏、化学吸收、吸附、固定床催化反应与流态化过程的应用举例;第7章介绍多组分传质的计算,包括传质系数及平衡组成;第8、9章分别讨论传质过程中的界面效应,包括 Marangoni 效应、Rayleigh 效应以及采用格子-Boltzmann 方法在界面传质的模拟。书中附录 I 和附录 II 分别扼要叙述计算流体力学和计算传热学的基础,作为计算传质学的相关知识;通过附录 III、附录 IV 和附录 V 分别给出了文献中较为常用的填料塔的传质系数、有效传质面积以及持液量的有关关联式;关于用于格子-Boltzmann 方法的粒子平衡态分布函数的推导及其与 Navier-Stokes 方程之间的关系分别由附录 VI 和附录 VII 给出。

总的来说,计算传质学、计算流体力学、计算传热学三者构成了计算传递学的主要内容,它是计算化学工程的重要基础。其中由计算传质学得出的浓度分布及浓度动力学的情况对过程效率的影响很大,应受到重视。

第1章 计算传质学基本方程

计算流体力学和计算传热学的近代发展能够预测设备内进行流动或者进行传热过程的速度分布（速度场）和温度分布（温度场）。但对于浓度分布（浓度场）的研究仍旧欠缺。然而对于化学工程及相关的过程工业来说，研究设备内的浓度分布及其规律则是十分重要的。特别是随着近代化工生产中传质设备的大型化及结构复杂化，其中传质过程又与流动及传热过程密切耦合相关，因而构成大型微分方程组。同时由于大多数化工传质过程都是在湍流条件下进行，其复杂的传质特性尚没有严格的理论模型加以描述，在数学上导致上述方程组不能封闭。因而进一步全面了解传质现象，预测传质效率、传质设备内浓度分布的传质规律及与传质有关的参数，从而能够精确模拟放大，成为有待解决的重要问题。

计算传质学的目的就是发展湍流条件下的传质理论，进而解决方程组的封闭问题，实现传质过程精确模拟和传质效率的准确预测，使过程放大更加科学化。

两相间组分传质是通过相间界面而实现的。气液两相的化工传质过程的能耗很大，因此计算传质学的内容包括下列两个部分。

① 过程计算 主要计算局部浓度、速度及温度的分布和有关参数，这些都是设备模拟放大和设备设计所必需，也是评估现有设备传质效率的依据。计算模型将在本章中介绍。

② 界面计算 主要预测界面效应对传质的影响，例如 Marangoni 对流及 Rayleigh 对流，这些效应将会导致分离效率的提高。此外，界面传质是过程传质的基本步骤，需要深入了解，这将在第 8、9 章介绍。

1.1 质量守恒方程及其封闭

对于在低雷诺数流动无湍流时的传质过程，传质组分的质量守恒方程如下：

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_i c) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) + S_n \quad (1-1)$$