

WILEY

# 反应流：理论与应用

**Chemically Reacting Flow: Theory and Practice**

罗伯特·J.基 (Robert J. Kee)  
[美] 迈克尔·E.科尔特林 (Michael E. Coltrin) 著  
彼得·格拉博格 (Peter Glarborg)

史翊翔 蔡宁生 王雨晴 译

清华大学出版社



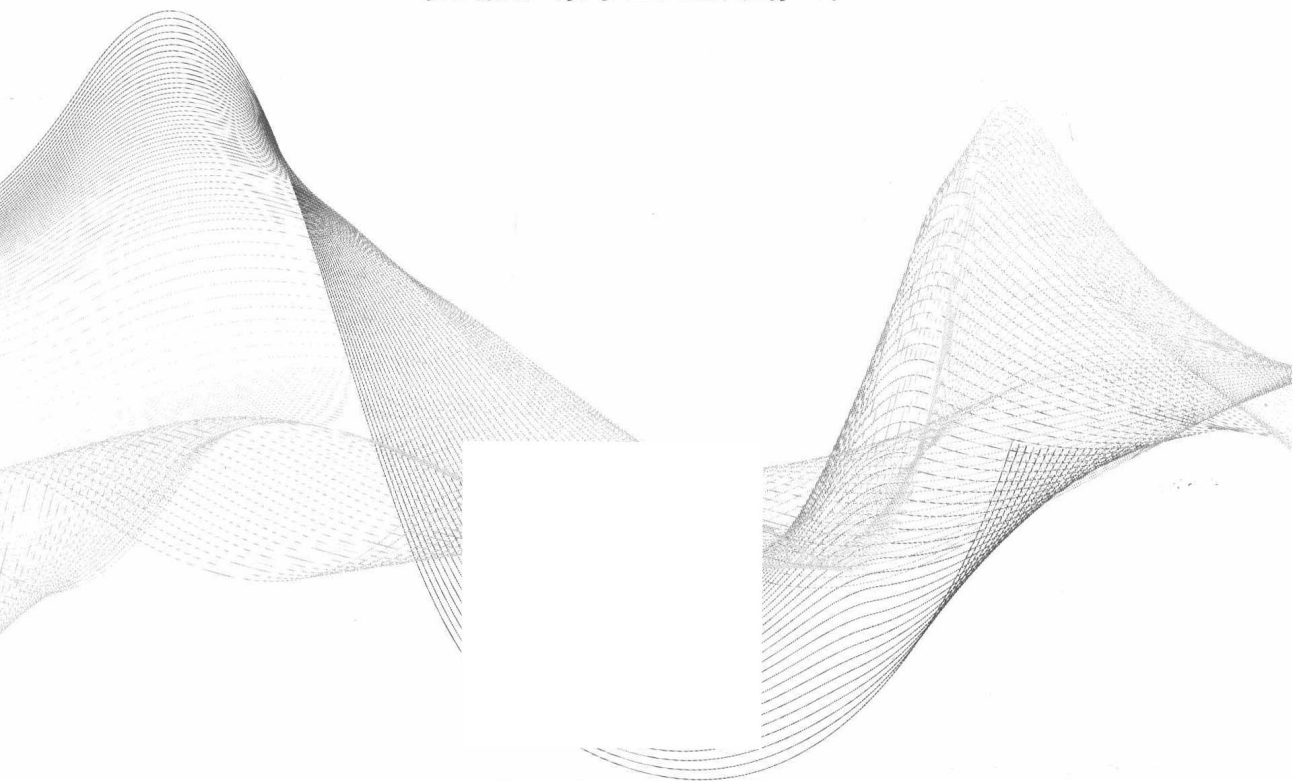


# 反应流：理论与应用

Chemically Reacting Flow: Theory and Practice

罗伯特·J.基 (Robert J. Kee)  
[美] 迈克尔·E.科尔特林 (Michael E. Coltrin) 著  
彼得·格拉博格 (Peter Glarborg)

史翊翔 蔡宁生 王雨晴 译



清华大学出版社  
北京

## 内 容 简 介

本书致力于辅助工程师用于化学反应流过程的设计与优化。第1~7章严格推导了流体动力学所涉及的控制方程,并在边界层流动中对其进行了简化。第8~12章给出了确定热力学和传递性质的方法,并且讨论了均相与非均相化学反应的速率表达式。第13、14章描述了化学反应机制的开发过程,对个别的反应给出了系统的描述。第15章提供了一些数值求解中所用的储备知识,以解决化学反应应用中常遇到的刚性非线性问题。第16、17章讨论了化学反应流的应用。

本书即可作为化学工程等相关领域的参考书籍,也可作为高等学校教材使用。

Copyright © 2003 by John Wiley & Sons, Inc. All Rights Reserved.

This translation published under license. Authorized translation from the English language edition, entitled *Chemically Reacting Flow: Theory and Practice*, ISBN 978-0-471-26179-7, by Robert J. Kee, Michael E. Coltrin, Peter Glarborg, Published by John Wiley & Sons. No part of this book may be reproduced in any form without the written permission of the original copyrights holder.

北京市版权局著作权合同登记号 图字: 01-2015-2330

本书封面贴有 John WILEY 防伪标签,无标签者不得销售。

版权所有,侵权必究。侵权举报电话: 010-62782989 13701121933

### 图书在版编目(CIP)数据

反应流: 理论与应用/(美)罗伯特·J. 基(Robert J. Kee), (美)迈克尔·E. 科尔特林(Michael E. Coltrin), (美)彼得·格拉博格(Peter Glarborg)著; 史翊翔, 蔡宁生, 王雨晴译. —北京: 清华大学出版社, 2018

书名原文: *Chemically Reacting Flow: Theory and Practice*

ISBN 978-7-302-45882-1

I. ①反… II. ①罗… ②迈… ③彼… ④史… III. ①流体动力学 IV. ①O351.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 032725 号

责任编辑: 袁 琦

封面设计: 何凤霞

责任校对: 刘玉霞

责任印制: 丛怀宇

出版发行: 清华大学出版社

网 址: <http://www.tup.com.cn>, <http://www.wqbook.com>

地 址: 北京清华大学学研大厦 A 座 邮 编: 100084

社 总 机: 010-62770175 邮 购: 010-62786544

投稿与读者服务: 010-62776969, [c-service@tup.tsinghua.edu.cn](mailto:c-service@tup.tsinghua.edu.cn)

质量反馈: 010-62772015, [zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn](mailto:zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn)

印 装 者: 清华大学印刷厂

经 销: 全国新华书店

开 本: 185mm×260mm 印 张: 41

字 数: 993 千字

版 次: 2018 年 11 月第 1 版

印 次: 2018 年 11 月第 1 次印刷

定 价: 158.00 元

产品编号: 063353-01

## FOREWORD

## 序一

I first met Prof. Yixiang Shi in the summer of 2007 when he was a visiting scholar at the University of California, Irvine, working on modeling solid-oxide fuel cells. Over the years, we have interacted at numerous scientific conferences. Additionally, I have had the pleasure of visiting with Prof. Shi and his students at Tsinghua University on several occasions.

We are delighted that Prof. Shi and his students have taken the initiative to translate our book into Chinese. We will be very pleased and gratified if Chinese students and researchers can benefit from our derivations and discussion of chemically reactive fluid-mechanical fundamentals. The ability to formulate and solve new chemically reacting flow problems will surely play increasingly important roles in the development and deployment of new efficient energy conversion processes and environmentally sustainable technologies.

In somewhat of a departure from numerous classical books in fluid mechanics and transport processes, this book formulates computational approaches from the outset. With increasingly accessible and powerful computational facilities on everyone's desktop, such an approach enables the convenient solution of technologically relevant fluid-mechanical problems that assist in the innovative design and effective operation of widely ranging chemical processes.

We thank Prof. Shi for making our book more accessible to a wider global readership, which will hopefully play at least some role in assisting researchers who will develop the next generation of chemical technologies.

Prof. Robert J. Kee

我最初认识史翊翔副教授是在 2007 年夏天,当时他在加州大学欧文分校做访问学者,主要从事固体氧化物燃料电池的模拟工作。在随后的这些年中,我们又在众多的学术会议中交流颇多。此外,我非常荣幸多次受邀去清华大学拜访史老师和他所在课题组的成员。

当得知史老师以及他的学生们打算将我们的书翻译成中文时,我们十分高兴。如果中国的学生与研究者可以从我们对于化学反应流的基础问题的讨论中得到一些收获,我们将非常开心与满足。在新型高效能源转换过程及可持续发展科学技术的发展与应用中,对新的化学反应流问题进行建模与求解的能力无疑将会起到越发重要的作用。

与众多的关于流体力学与传递过程的传统书籍不同,本书从最开始就以公式的形式给出了计算方法。随着个人电脑上越发强大的计算软件的普及,这种计算方法可以方便地对流体力学相关的问题进行求解,从而辅助新型构型的设计以及化学反应过程的宽范围模拟。

我们感谢译者将我们的书带给更多的读者,希望此书可以帮助那些开发下一代化学技术的研究者。

罗伯特·J. 基教授

You, dear reader, are holding a classic textbook in your hands. This excellent book will provide you with the fundamentals of reaction chemistry in fluid flows. Since complex reacting systems can be found in many important manifestations and applications, including combustion, atmospheric chemistry, catalysis, and chemical vapor deposition, it is important to understand the principles that enable identifying key reactions and conditions, developing suitable mechanisms, and designing, scaling, and optimizing successful processes on this basis. Real-world problems and industrial applications with high economic and environmental impact depend on such knowledge as presented here. These may include deposition of functional materials with desired optical, electronic, and magnetic properties for micro-and nano-electronics devices and sensors as well as protective and decorative coatings. They may address energy conversion processes such as in combustion, where suitable reaction conditions must be chosen for high efficiency and low carbon signature as well as compliance with emission standards, including efficient process control. Further processes include catalytic conversion, one of the most valuable concepts for chemical production and process aftertreatment that enables, for example, access to many consumer goods used in all parts of everyday life.

While reaction conditions, reactor sizes and geometries, delivery strategies, flow properties, and other parameters can vary greatly in these applications, it is highly valuable to understand that the fundamental principles underlying such processes are similar, and that you will find the respective ingredients in this book: the fundamental kinetics to describe the chemical reactions in the gas phase and at the surface of the relevant system, and the fluid mechanics to describe the flow. Whether you are a practicing professional, a student or a scientist new to the field—you will find a highly concise resource for your work with this seminal contribution.

More specifically, the book introduces into the derivation of the appropriate governing

equations for a respective system, the determination or estimation of the pertinent properties, and the numerical procedures for their solution. An important focus is on the thermodynamic, transport, and reaction kinetic properties of the system, including homogeneous gas-phase and heterogeneous, boundary-layer reaction behavior near a surface, with an emphasis on suitable reaction mechanism development. Flows considered are laminar, and because of the chemical complexity, simplifications in the geometry to consider near-practical problems reduced to laboratory situations of only zero or one dimension are of considerable value. Throughout, numerical solutions of the respective governing equations are advocated, and introduction into suitable solvers and software packages are provided together with a number of practical examples.

Not only will you, the reader, find in this book a valuable guide to conceive solutions for reactive systems of your own interest, but you will also witness along the way some of the history-computational prediction of the behavior, design, and optimization of chemically reactive processes and systems has matured to become an ubiquitous tool in the time since the pioneers who contributed to this book have facilitated its introduction.

With high respect for the services that this book and the concepts behind it have provided to the community, I recommend it to you and wish you a fruitful and successful application of its fundamental concepts and methodology to solving problems of your own discipline and profession.

Bielefeld, August 2017

Katharina Kohse-Höinghaus

Senior Professor of Physical Chemistry

Bielefeld University, Germany

Past President of the Combustion Institute

亲爱的读者,你们正在阅读的是一本经典教材。这本杰出的书将提供给你有关流体化学反应的基础。由于复杂的反应系统存在于非常多的重要的应用中,包括燃烧、大气化学、催化以及化学气相沉积,因此,理解可以鉴别重要反应与条件、开发合适的化学反应机制以及在此基础上对化学反应过程进行设计、放大与优化的原理是十分重要的。解决真实世界中的问题以及开发经济环保的工业应用依赖于本书中提供的知识理论。这些问题可能包括沉积具有某些光学、电学及磁学特性的功能性材料,这些材料可用作微纳电子设备与传感器以及保护与装饰涂层。利用这些知识理论,还可以处理能量转换过程比如燃烧中的问题,此时,需要选择合适的反应条件从而实现高效、低碳及低污染的目标。其他涉及的过程还包括催化转化过程,它是化学合成以及后处理中最有价值的概念之一,利用催化转化可以获得日常生活中的许多常用物品。

由于反应条件、反应器体积和形状、传递策略、流动特性以及其他参数都会对这些反应过程产生很大的影响,因此,研究者需要理解在这些过程背后相似的理论依据。你会在此书中找到这些理论依据:描述气相中以及表面上化学反应的基本动力学,以及描述流动的流体力学。无论你是一个专业人员,一个学生或者一个新接触此领域的科学家,你都会在本书中找到从事你所做研究所需的高度精练的资源。

具体地说,本书介绍了针对特定系统的控制方程的推导过程,对于相关物性参数的获得与估计方法,以及求解方程的数值计算流程。此书尤其关注了系统热力学、传递以及反应动力学特性,包括均相的气相反应以及非均相的表面附近的边界层反应行为,并着重描述了开发合适的反应机理的过程。本书所涉及的流动为层流,由于复杂的化学反应,将近实际问题进行了几何简化,简化为实验室条件下的零维或一维问题。本书提倡利用数值方法对相关的控制方程进行求解,结合多个实例,介绍了合适的求解器与求解软件。

作为读者,在本书中你不仅会找到你所关心的问题的求解方法,还会在某些方面见证历史——由于本书的先锋们促进了模拟方法的引入,对于化学反应过程的预测、设计与优化已经发展成为普遍的工具。



出于对本书对公众所提供的服务以及观念的高度尊重,我将此书推荐给你,希望此书中的观念及方法可以在你自己的研究领域中有成功的应用。

比勒菲尔德,2017年8月  
凯瑟琳娜·科瑟-赫英郝斯  
物理化学教授  
比勒菲尔德大学,德国  
前燃烧协会主席

本书的作者 Robert J. Kee、Michael E. Coltrin 以及 Peter Glarborg 是蜚声国际的能源化工领域专家,在化学反应过程的设计开发及优化研究中有超过 30 年的丰富经验。早在 20 世纪 70 年代,Robert J. Kee 教授及其同事就开始从事化学反应流模拟的相关研究,并开发了 Chemkin 软件,该软件在随后的几十年中被化学反应流相关的研究者广泛使用。

化学反应流涉及的领域十分广泛,如燃烧、化学合成、材料加工等,而这些都会影响到我们生活的方方面面。本书旨在介绍处理化学反应流问题的通用方法,通过对该过程中的流动、传递及反应进行阐述,帮助相关领域的工程师或科研人员建立模型对观察到的物理现象进行阐释,并对相关的工艺过程进行设计优化。本书是从事化学反应流动过程相关研究的科研工作者的有力工具,多年来畅销于北美,但在中国尚未有中译本出版发行,而这也是我们对本书进行翻译的原因。通过将此书呈现给中国的读者,希望可以帮助读者理解化学反应流过程的基本原理,而这些基本原理可用于解决实际问题,同时还可以作为这一领域的深入学习的入门书籍。

这样一部巨著的翻译工作,绝非仅凭两三人之力即可完成的任务,在翻译此书的过程中,清华大学热能工程系的吕杨、曾洪瑜、张越、唐斌、林瑞霄、马金侠、李烨、梁学胜、谢鸿、郝培璇、宋佩东、吴益扬、郑艺、杨天颖等同学做出了突出贡献,在此表示诚挚的谢意!感谢清华大学出版社的袁琦编辑在本书的编辑过程中所做的工作。

最后,感谢原著作者给我们翻译此书的机会,让我们可以将这本《反应流:理论与应用》呈现给国内读者。

译者

2017 年于清华大学

本书致力于辅助工程师用于化学反应流过程的设计与优化。虽然化学反应流所涉及的领域十分宽泛,本书的关注点却非常集中,尤其是针对管内层流,且反应器表面耦合非均相化学反应的流动给予了特别的关注。对这种流动的关注源于制备薄膜工艺以及燃烧过程中的应用。然而,由于本书的内容扎根于基础概念,读者需要准备好将这些基础概念拓展到新的应用领域。我们希望本书既可以用于一些领域的参考书籍,也可以用于高校教材。

化学反应流中所涉及的流体几何与化学反应几乎有无限种可能。因此,研究人员需要给出恰当的控制方程,并且通过一系列物理与数学的方法对其进行简化,从而对方程进行求解以得到符合实际的解。发展一系列控制方程的重要方面在于判定或估计流动中涉及的化学组分的热力学、传递以及化学性质。

从流体动力学的角度,我们将关注点放在边界层内的黏性行为。表面附近的边界层行为对产物经常有决定性的影响,比如均匀薄膜生长过程中。在边界层流动的分析中,经常可以利用一些重要的数学特性对控制方程进行简化。更重要的是,正式边界层的某些特性对于反应过程的特性具有决定性的作用。与很多流体动力学文献不同的是,本书着重于描述内部流动中的边界层问题,而非外部边界层(外部边界层在航空动力学中应用广泛)。

求解纳维-斯托克斯方程通常需要利用数值方法求解,目前已经有很好的商业软件可以实现此功能。然而,正如流体动力学书籍中所说的,利用传统的求解偏微分方程的方法可以对边界层流动的某些流体动力学特征进行数值求解。在本书中,我们直接给出了方程的数值表达以及求解结果,即便有些地方可以得到解析解。这种处理方法的原因是即便最简单的化学反应问题也需要进行数值求解。因此,我们从相对简单的流动边界层问题开始发展数值求解的方法,以便将其用于其他我们感兴趣的问题。

本书的读者需具有流体动力学、热力学、传热学以及工程数学的本科专业背景。本书作为教材所面对的学生应是机械或化学工程专业的高年级本科生或研究生。不同专业的学生的物理化学背景不尽相同,因此,将本书作为教材时也应对其中的内容有所侧重。我们将本书分成了不同的章节,以便供不同的读者使用。

在一门以流体动力学为主的课程中,读者可主要学习第1~7章的内容。这几章严格推

导了流体动力学所涉及的控制方程,并在边界层流动中对其进行了简化。其中考虑了质量传递过程,但针对化学反应的讨论十分有限。这些问题可以直接用数值方法求解,这些方法经常以电子表格的方式给出。

第 8~12 章给出了确定热力学和传递性质的方法,并且讨论了均相与非均相化学反应的速率表达式。这些章从物理化学的角度对问题进行描述,有两方面的目的:其一是为读者提供理解在化学反应模拟中所需参数的必备知识;其二是给出估计物性参数所需的定量方法,尤其是对于参数未知的新过程或组分。第 13、14 章集中于描述化学反应机制的开发过程,对个别的反应给出了系统的描述。

第 15 章提供了一些数值求解中所用的储备知识,以解决化学反应应用中常遇到的刚性非线性问题。由于本章所学习的内容可以在其他章有关化学反应的习题中得到应用,本章并未单独给出课后习题。第 16、17 章集中于讨论化学反应流的应用。由于这两章的课后习题涉及相对复杂的化学反应,读者需具有数值模拟软件或在练习中开发一些数值算法。Chemkin 软件及其相应的数值求解软件是求解这些习题的合理的选择<sup>[5]</sup>。当然,其他软件比如 Cantera 也是很好的选择<sup>[152]</sup>。其中有些问题需要使用一些电子文件,比如化学反应机理。描述这些问题的文件需要具有“文件名. ext”的格式。这些文件可以从 John Wiley & Sons 网站上进行下载。

罗伯特·J. 基

戈尔登,科罗拉多州

迈克尔·E. 科尔特林

阿尔布开克,新墨西哥州

彼得·格拉博格

林比,丹麦



## ACKNOWLEDGEMENTS

## 致谢

借由此书,希望将我们在化学反应流的研究与应用领域积累的超过 20 年的经验进行总结。特别是在 Chemkin 软件的开发与使用中实践了本书所讨论的诸多理论。

从 20 世纪 70 年代末开始,Jim Miller 与 Bob Kee 开始在圣地亚国家实验室针对燃烧化学反应动力学与火焰结构开展合作。即便当时只是一个刚毕业的博士,Jim 在流体力学、热力学与化学领域已有了非常深刻的见解,并且对在未来数十年中燃烧模拟需要如何开展有着非常敏锐的视角。这些理论基础与视角为本书中所讨论的诸多方面奠定了基础。

当然,数值模拟需要基于物理描述的数学模型,并且需要数值计算工具对模型进行求解。我们非常幸运在 20 世纪 80 年代可以与一群在圣地亚国家实验室工作的卓越的数值求解方面的专家进行合作。他们是开发数值程序以及软件算法的最初力量。这些专家包括 Tom Manteuffel(科罗拉多大学),Tom Jefferson(圣地亚国家实验室),Linda Petzold(加州大学圣塔芭芭拉分校),Mitch Smooke(耶鲁大学),以及 Joe Grcar(劳伦斯伯克利国家实验室)。在此,我们要特别感谢 Linda Petzold,因为我们的合作持续了将近 20 年。在 20 世纪 80 年代初期,Bob Kee 和 Jim Miller 开始与 Mike Coltrin 合作,针对化学气相沉积过程的模拟开展研究,这个过程需要着重考虑非均相化学反应。Greg Evans(圣地亚国家实验室)在此过程中给予了极大的帮助,使我们可以在复杂的反应器构型中耦合复杂化学反应求解纳维-斯托克斯方程。此外,Bill Breiland, Pauline Ho, 以及 Harry Moffat(三位均在圣地亚国家实验室工作)在开发化学反应机制以及实验验证中给予了重要帮助。

在 20 世纪 80 年代最初的 Chemkin 软件完成后,我们建立了一个框架从而可以耦合新的模型。这样我们便可以将这个耦合的模拟工具进行有效扩展以满足更加具有挑战性的应用。这些年中,超过 20 个研究者对 Chemkin 的完善做出了贡献,其中主要包括 Fran Rupley(反应设计公司),Ellen Meeks(反应设计公司),Rich Larson(圣地亚国家实验室)以及 Andy Lutz(圣地亚国家实验室)。

在拓展模拟能力的过程中,密切的国际合作起了至关重要的作用。与 Jürgen Warnatz(海德堡大学)课题组的超过 20 年的合作对我们的模拟理念有着深切的影响。与 Graham Dixon-Lewis(利兹大学)以及 Jürgen Warnatz 的合作直接促成了分子输运的描述及其在

Chemkin 中的实现。最初的旋流反应器的模拟软件源于与 Peter Glarborg(丹麦技术大学)的合作, Peter Glarborg 与 Jim Miller 随后在氮化学反应领域继续开展合作。我们关于不同燃烧过程中的流体动力学相似性的理解很大程度上受益于与 Tadao Takeno(名城大学, 日本)的长期合作。

此外, 我们在与 Dave Goodwin(加州理工大学)的合作中受益匪浅, 他为化学反应流模拟的未来发展提供了视角。特别的, 他致力于开发理论模拟软件以将不同时间尺度与空间尺度的模型进行耦合。他同样致力于用现代的高水平的编程语言开发模型, 包括在本书中我们讨论的一些, 所使用的软件包为 Cantera。

感谢国家能源局(DOE)基础能源科学办公室材料科学部对于化学气相沉积程序开发的长期资助。感谢国家能源局化学科学部通过燃烧研究室对 Chemkin 开发的大力支持。

衷心感谢 Bill Barcker(ITN 能源系统公司)的长期支持, 他作为 DARPA 项目经理对材料过程应用软件的发展方向具有巨大的影响。他是最早意识到模拟复杂的化学反应流在实际材料合成的设计与优化中会起到直接的有益影响的人之一。我们同样感谢 Sematech 对薄膜处理应用的支持, 感谢气体研究协会对燃烧研究的支持。

1996 年, Bob Kee 入职科罗拉多矿业大学, 从而产生了出版教学导向的书籍的需求。与 Laxminarayan Raja 的密切合作在本书的早期撰写中价值巨大。在科罗拉多矿业大学研究化学反应流的团队日益壮大, 包括: Mark Linne, Terry Parker, Tom Mckinnon, Colin Wolden, Jean-Pierre Delplanque, Huayang Zhu, 以及 Tony Dean。平日与这些同事在科研与教学中的合作是本书撰写中的极有价值的经历。特别是 Huayang Zhu 博士, 以及课题组研究生 Wenhua Yang 与 Kevin Walter 在本书习题的撰写与求解中有着直接的贡献。

Peter Glarborg 衷心感谢他与 Jim Miller 在高温气相化学领域的长期密切合作, 感谢丹麦技术大学同事 Anker Jensen, Jan Johnsson 以及 Kim Dam-Johansen 在化学反应工程领域的合作。此外, 与很多科学家包括 Per Gravers Kristensen, Maria Alzueta 以及 Martin Skov Skjøth-Rasmussen 等在动力学研究领域的合作同样具有非常重要的价值。感谢 John Kramlich, Jerry Cole 以及 Irv Glassman 在课后习题编撰中的贡献。感谢丹麦能源局、北欧气体科技中心、气体研究协会(美国)以及 CHEC(Combustion and Harmful Emission Control)研究项目的长期资助。

Mike Coltrin 衷心感谢与 Bill Breiland, Paulin Ho, Harry Moffat 以及 Randy Creighton 在圣地亚国家实验室的长期密切合作。感谢 Jeff Tsao 在本书的最初撰写过程中给予的支持与鼓励, 感谢 Jeff Cederberg 与 Mariam Gonzalez-Debs 对书稿提出的技术建议。

最后, 在全世界范围内有许多使用 Chemkin 软件的科研工作者, 我们感谢在使用这个软件过程中与研究者的合作。尽管在此不能一一列出他们的名字, 他们的反馈对于此模拟工具的开发优化具有重要的影响。

R. J. K.

M. E. C.

P. G.

# NOMENCLATURE

# 符号列表

|                  |                     |                                          |
|------------------|---------------------|------------------------------------------|
| $A$              | 阿伏伽德罗常量             | 1/mol                                    |
| $A$              | 面积                  | $\text{m}^2$                             |
| $A$              | 亥姆霍兹自由能             | J/mol                                    |
| $\overline{A}_k$ | 组分 $k$ 的偏摩尔亥姆霍兹自由能  | J/mol                                    |
| $A$              | 阿累尼乌斯表达式中的指前因子      |                                          |
| $A_\infty$       | 阿累尼乌斯表达式中指前因子的高压极限  |                                          |
| $A_0$            | 阿累尼乌斯表达式中指前因子的高压极限  |                                          |
| $A^*$            | 处于内部激发态的分子 $A$      |                                          |
| $A^\ddagger$     | 活化络合物               |                                          |
| $a$              | 音速                  | m/s                                      |
| $a_i$            | 应变率                 | 1/s                                      |
| $a_{ii}$         | $A_i$ 的 Sonine 展开系数 |                                          |
| $a_k$            | 组分 $k$ 的活度          |                                          |
| $a_{n,k}$        | 黏度的多项式系数            |                                          |
| $a$              | 流体加速度               | $\text{m/s}^2$                           |
| $B_i$            | $\Phi_i$ 的展开式的标量函数  |                                          |
| $b$              | 碰撞参数                | m                                        |
| $b_{\max}$       | 反应发生的最大碰撞参数         | m                                        |
| $b_i$            | 黏附系数表达式的温度指数        |                                          |
| $b_{ii}$         | $B_i$ 的 Sonine 展开系数 |                                          |
| $b_{n,k}$        | 导热系数的多项式系数          |                                          |
| CS               | 控制面                 |                                          |
| CV               | 控制体                 |                                          |
| $Cl_k$           | 组分 $k$ 的消耗系数        |                                          |
| $\dot{C}_k$      | 反应产生组分 $k$ 的速率      | $\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ |

|                                          |                       |                    |
|------------------------------------------|-----------------------|--------------------|
| $C_p$                                    | 定压摩尔热容                | J/(mol · K)        |
| $C_v$                                    | 定容摩尔热容                | J/(mol · K)        |
| $C_{\text{internal}}$                    | 内部自由度对 $C_v$ 的贡献      | J/(mol · K)        |
| $C_{\text{trans}}$                       | 平动对 $C_v$ 的贡献         | J/(mol · K)        |
| $C_{k, \text{rot}}$                      | 组分 $k$ 的转动对 $C_p$ 的贡献 | J/(mol · K)        |
| $c_p$                                    | 单位质量的定压比热             | J/(kg · K)         |
| $c_{pk}$                                 | 组分 $k$ 的定压比热          | J/(kg · K)         |
| $c_v$                                    | 单位质量的定容比热             | J/(kg · K)         |
| $c_{vk}$                                 | 组分 $k$ 的定容比热          | J/(kg · K)         |
| $c_i$                                    | 黏附系数表达式的活化能           | J/(mol · K)        |
| $D_h$                                    | 水力直径                  | m                  |
| $\dot{D}_k$                              | 反应消耗组分 $k$ 的速率        | mol/m <sup>3</sup> |
| $D_{jk}$                                 | 二元扩散系数                | m <sup>2</sup> /s  |
| $\mathcal{D}_{kk}$                       | 自扩散系数                 | m <sup>2</sup> /s  |
| $D_{kj}$                                 | 多组分扩散系数               | m <sup>2</sup> /s  |
| $D_{km}$                                 | 混合物平均的扩散系数            | m <sup>2</sup> /s  |
| $D_k^T$                                  | 组分 $k$ 的热扩散系数         | kg/(m · s)         |
| $D/Dt$                                   | 随体导数算子                |                    |
| $d$                                      | 分子半径之和                | m                  |
| $d_n$                                    | 第 $n$ 步的截断误差          |                    |
| $d_{n,k}$                                | 扩散系数的多项式系数            |                    |
| $E$                                      | 应变率张量(二阶张量)           | 1/s                |
| $E$                                      | 内能                    | J                  |
| $E_0$                                    | 基态能                   | J                  |
| $E_0$                                    | 阿累尼乌斯表达式中活化能的低压极限     | J/mol              |
| $E_a$                                    | 阿累尼乌斯表达式中的活化能         | J/mol              |
| $E_\infty$                               | 阿累尼乌斯表达式中活化能的高压极限     | J/mol              |
| $E_k$                                    | 动能                    | J                  |
| $E_t$                                    | 总能                    | J                  |
| $E_{\text{therm}}$                       | 超出基态的能量               | J                  |
| $\langle \Delta E_{\text{coll}} \rangle$ | 每次碰撞所传递的平均能量          | J                  |
| $e$                                      | 比内能                   | J/kg               |
| $e_t$                                    | 总比内能                  | J/kg               |
| $e_k$                                    | 组分 $k$ 的比内能           | J/kg               |
| $e_r$                                    | $r$ 方向的单位向量           |                    |
| $e_z$                                    | $z$ 方向的单位向量           |                    |
| $e_\theta$                               | $\theta$ 方向的单位向量      |                    |
| $e_n$                                    | 时间步长为 $n$ 时的误差        |                    |

|                    |                                |                                |
|--------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| $F$                | 压降函数                           |                                |
| $\mathbf{F}$       | 力的向量                           | N                              |
| $F_E$              | Troe 碰撞效率表达式中的常数               |                                |
| $F_{k,j}$          | $j$ 结点组分 $k$ 的残差               |                                |
| $f$                | 体积力                            | N                              |
| $f$                | 单位体积受力                         | N/m <sup>3</sup>               |
| $f$                | 摩擦因子                           |                                |
| $f^{(N)}$          | $N$ 个颗粒的速率分布函数                 |                                |
| $f^{(1)}$          | 单个颗粒的速率分布函数                    | s <sup>3</sup> /m <sup>6</sup> |
| $f_i$              | 组分 $i$ 的单个分子的速率分布函数            | s <sup>3</sup> /m <sup>6</sup> |
| $f'_i$             | 碰撞后速率分布函数                      | s <sup>3</sup> /m <sup>6</sup> |
| $f_i^{[r]}$        | 速率分布函数的 $r$ 阶近似                | s <sup>3</sup> /m <sup>6</sup> |
| $f(n, T)$          | 在温度为 $T$ 时能量 $n$ 所能形成激发态中间体的概率 |                                |
| $G$                | 生长速率                           | m/s                            |
| $G$                | 吉布斯自由能                         | J/mol                          |
| $\overline{G_k}$   | 组分 $k$ 的偏摩尔吉布斯自由能              | J/mol                          |
| $\Delta G_f^\circ$ | 标准状态下生成吉布斯自由能                  | J/mol                          |
| $\Delta G_r^\circ$ | 标准状态下反应吉布斯自由能                  | J/mol                          |
| $G_z$              | 格雷茨数                           |                                |
| $g$                | 重力加速度                          | m/s <sup>2</sup>               |
| $\mathbf{g}_{ij}$  | 相对速度矢量                         | m/s                            |
| $g_j$              | 量子态 $j$ 的简并度                   |                                |
| $g_j^e$            | 电子态 $j$ 的简并度                   |                                |
| $g_j^r$            | 旋转态 $j$ 的简并度                   |                                |
| $g_j^t$            | 平动态 $j$ 的简并度                   |                                |
| $g_j^v$            | 振动态 $j$ 的简并度                   |                                |
| $H$                | 焓                              | J                              |
| $H_k$              | 组分 $k$ 的偏摩尔焓                   | J/mol                          |
| $H^\circ$          | 标准状态焓                          | J/mol                          |
| $H_0^\circ$        | 基态的标准状态焓                       | J/mol                          |
| $\Delta H_f^\circ$ | 标准生成焓                          | J/mol                          |
| $h$                | 传热系数                           | W/(m <sup>2</sup> · K)         |
| $h$                | 比焓                             | J/kg                           |
| $h$                | 普朗克常量                          | J · s                          |
| $h_k$              | 组分 $k$ 的比焓                     | J/kg                           |
| $h^*$              | 入口处流体的比焓                       | J/kg                           |
| $h$                | 时间步长                           | s                              |
| $I$                | 总化学反应数                         |                                |
| $I$                | 单位矩阵                           |                                |