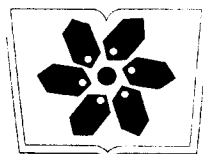


燃烧的数值模拟

谢坚行 著



科学出版社



中国科学院科学出版基金资助出版

燃烧的数值模拟

赵坚行 著

科学出版社

2002

内 容 简 介

本书是计算燃烧学方面的一本专著,它系统地叙述燃烧过程数值模拟中所涉及的基本理论、数学模型、数值解法以及数值模拟在实际工程装置中的应用,并着重介绍近年来计算燃烧学科最新的研究成果。

全书共分六章。第一至三章主要阐述燃烧过程数值模拟的基础理论知识,包括多组分气相粘性反应流动基本方程以及层流和紊流扩散燃烧,紊流流动的数学模型、大涡模拟及其在紊流燃烧中的应用,气体紊流燃烧的模拟、以及紊流两相流动与燃烧模拟。第四至六章着重叙述近代计算燃烧学的新发展。如在第四章的复杂形状燃烧室计算方法中系统地介绍了贴体网格生成和在任意曲线坐标系下两相燃烧流场数值求解方法、以及流场计算中新发展的数值方法;在第五章的燃烧过程污染物生成的模拟中主要介绍污染物生成的数学模型以及计算方法;在第六章的超音速流动与燃烧的模拟中阐述了超音速燃烧流场计算的数学模型与数值解法等内容。全书叙述力求简明扼要、突出重点,并注重汇集各种新方法和新理论及其应用。

本书可作为高等院校研究生和高年级本科生的计算燃烧学课程的教材或教学参考书,也可作为从事热能工程、工程热物理、流体力学、航空与航天、冶金与化工、核能工程等有关专业的高校教师、科研技术人员及工程技术人员的参考用书。

图书在版编目(CIP)数据

燃烧的数值模拟/赵坚行著.-北京:科学出版社,2002

ISBN 7-03-010342-4

I. 燃… II. 赵… III. 燃烧过程-数值模拟 IV. 0643.2

中国版本图书馆CIP数据核字(2002)第020367号

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

西源印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2002年6月第一版 开本:850×1168 1/32

2002年6月第一次印刷 印张:13 3/8

印数:1-2000 字数:365000

定价:36.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈新欣〉)

序 言

燃烧过程是受流动(包括湍流)、传热传质和化学反应控制的极其复杂的物理化学过程。直到 20 世纪 70 年代以前,燃烧的数学理论仅限于描述基本现象,它在燃烧技术上的应用局限于定性分析。当时,燃烧室和燃烧炉的设计主要依靠实验和经验、半经验的设计计算方法。30 多年来,流动、传热传质和燃烧的数值模拟理论、方法和计算程序的研究得到迅速发展。今天,燃烧的数学理论已经成为通过燃烧过程数值模拟来发展燃烧技术和指导燃烧装置设计的有力工具。在国内外,著名的商业软件如 FLUENT, STAR-CD, CFX, PHOENICS 等已经成为大家熟悉的燃烧过程数值模拟的软件,在热能、航空航天、化工、冶金、交通等领域得到了广泛的应用。而且各个公司、研究所和高等学校还有自行研制的有特色的软件。这一方面如此迅速的发展是出乎人们意料的。在我国,燃烧过程数值模拟的研究最早出现于 20 世纪 70 年代末。中国科学院工程热物理研究所、中国科学技术大学和本书作者所在的南京航空学院(现南京航空航天大学)是最早从事这方面研究的单位,起了十分重要和不可磨灭的先导作用。随后清华大学、西北工业大学、浙江大学、北京航空学院(现北京航空航天大学)、华北电力学院研究生部、华中工学院(现华中科技大学)、中国科学院力学研究所、南京工学院(现东南大学)、西安交通大学等单位纷纷展开了这方面的研究。现在我国这方面的研究和应用成果已经跻身世界先进的行列。例如,清华大学等单位有关两相湍流模型和两相燃烧双流体模型的研究受到国际学术界的重视和肯定,先后多次被列为国际会议邀请报告。目前国内很多单位都认识到这方面研究的重要性,投入了相当的研究力量。

本书作者赵坚行教授是我国最早从事燃烧过程数值模拟研究

的专家之一,在本领域有很深的造诣。多年来她致力于研究和发展湍流燃烧模型、新的数值求解方法和计算技巧。特别是针对航空发动机燃烧室的特点,对复杂计算域网格生成、贴体坐标、污染物生成的模拟、超音速流动和燃烧的模拟等方面,进行了深入的研究,取得卓有成效的研究成果。同时,在应用中也取得显著成效。本书是她多年来科研和教学工作的结晶,是一本不可多得的高水平专著。

在本书出版以前,国内曾出版过一些燃烧过程数值模拟方面的书籍,如《燃烧过程数值计算》(王应时、范维澄、周力行、徐旭常,1986),《燃烧室和工业炉的数值模拟》(周晓青、陈熙译,1986),《湍流两相流动和燃烧的数值模拟》(周力行,1991),《湍流计算模型》(陈义良,1991),《流动及燃烧的模型与计算》(范维澄、万跃鹏,1992),《湍流气粒两相流动和燃烧的理论及数值模拟》(周力行,1994)等。本书也是一本这方面的专著。它阐述了湍流模型、湍流燃烧模型和污染物生成模型、数值解法等各方面的基本问题。但是本书和上述这些书籍相比有着鲜明的特点。一个是引入了作者本人多年的研究成果,如湍流燃烧模型和污染物生成模拟等方面的研究成果。再一个是引入最新的国外研究成果,如湍流流动的大涡模拟和湍流燃烧的大涡模拟、超音速燃烧的模拟等。最明显的特点是,本书系统地总结了复杂形状计算域的网格生成、贴体坐标和数值解法、污染物生成的模拟和超音速流动与燃烧的模拟,这些内容都是前述的书籍中所没有或者很少涉及到的,但是对研究燃烧过程数值模拟又是十分重要的。此外,以前出版的这些专门书籍印数都很少,早已销售一空,目前很难找到。因此进入21世纪之后,本书的出版一定能满足当前读者的要求。相信本书的出版会进一步促进国内燃烧过程数值模拟的研究和应用,使本领域能达到更高的水平。

最后预祝赵坚行教授在未来的科研和教学工作中取得更大的成就。

周力行

2001年10月19日于北京清华园

前 言

长期以来燃烧系统研制主要依靠大量试验和传统的经验、半经验设计方法进行,但随着电子计算机的出现到普及、现代数学的迅速发展,用数值方法模拟燃烧系统中流动、传热传质、化学反应等过程已成为可能。这种理论预测方法得到了燃烧界的热心关注和重视,使之在工程问题中得到推广与应用,形成了一门新兴的边缘学科——计算燃烧学或数值燃烧学。30多年来计算燃烧学的蓬勃发展,充分显示了它的强大生命力,它在用传统燃烧理论分析难以解决的复杂几何形状燃烧装置的燃烧问题,以及受到试验设备和测量装置限制使实验很难实现的燃烧问题中表现出其独特的优越性,在不断地深化和发展中它已成为开展先进燃烧技术研究和燃烧系统优化和改进设计的有力工具。为了满足先进燃烧技术发展的需要,国内外各大公司、研究所和高等院校纷纷研制燃烧过程数值模拟软件。与此同时,国内外许多高等院校都为研究生开设了“计算燃烧学”课程。与该课程相对应,配备一本合适的研究生教材或可供从事燃烧数值计算的科学研究与技术人员用的参考书是必不可少的。

虽然在本书问世之前,国内已出版了一些有关燃烧数值计算方面的书籍,但是近10年来,计算燃烧学无论在国际上还是在国内都处在蓬勃发展的旺盛时期,特别是在复杂形状计算区域网格生成及其流场计算方法、燃烧污染物生成的模拟以及超音速流动与燃烧计算等方面都有了许多新的进展。因此,有必要编写一本能够充分反映我国当前本学科的学术水平和国内外最新的研究成果的书籍,以满足读者的需要。此外,这又是一本教材,其内容必须有一定的系统性,并有足够的深度和广度,深入浅出,重点突出,便于读者自学。

在全书编写中注意物理概念的论述,使读者能充分利用自己对物理过程的认识来加深对数学模型和计算方法的理解;同时也力求反映国内外近期的研究成果,以便让读者较快地接近本学科前沿。本书不仅介绍数学模型及其数值解法,而且还讨论其模拟结果及其在工程问题中应用前景。为了方便读者,本书在选材上力求相对完整,使读者不必过多参阅文献就能基本了解和掌握其主要内容。

著者衷心感谢周力行教授在百忙中审阅了本书并提出了宝贵的意见,还为本书写了序言。感谢我的学生们:雷雨冰博士后、伍艳玲博士、胡好生高级工程师以及周峰轮、周琳、程萃莘等同志,他们在读书期间的出色工作以及所完成的研究生学位论文充实了本书的内容。中国科学院科学出版基金委员会对本书的出版给予资助,著者在此敬谢。著者希望本书的出版能有助于促进我国燃烧过程数值模拟的研究与应用,有助于促进计算燃烧学科的交流与发展。

著者恳切希望能得到使用本书的教师、学生和广大读者的批评和指正。

赵坚行

2002年1月5日于南京航空航天大学

目 录

序言

前言

第一章 多组分气相粘性反应流动	(1)
1.1 质量交换	(1)
1.2 混气流动的动量方程和能量方程	(6)
1.3 简单化学反应系统	(10)
1.4 层流射流扩散火焰	(19)
1.5 紊流射流扩散火焰	(27)
1.6 燃烧过程的相似	(32)
参考文献	(34)
第二章 紊流流动的模拟	(35)
2.1 紊流流动基本概念	(36)
2.2 $k-\epsilon$ 模型及其改进	(51)
2.3 雷诺应力模拟	(63)
2.4 代数雷诺应力模拟	(71)
2.5 大涡模拟和亚网格尺度模型	(81)
参考文献	(91)
第三章 气体紊流燃烧的模拟	(96)
3.1 引言	(96)
3.2 紊流扩散火焰模型	(98)
3.3 紊流预混火焰模型	(110)
3.4 有限反应速率模型	(118)
3.5 复杂化学反应	(124)
3.6 紊流两相流动与燃烧模拟	(139)
3.7 大涡模拟在燃烧流场中应用	(161)

参考文献	(178)
第四章 复杂形状燃烧室的计算方法	(186)
4.1 引言	(186)
4.2 贴体坐标系	(196)
4.3 三维任意曲线坐标系	(219)
4.4 流场计算中新的数值方法简介	(253)
参考文献	(265)
第五章 燃烧过程中污染物生成的模拟	(272)
5.1 污染物的生成模型	(273)
5.2 经验分析方法	(302)
参考文献	(326)
第六章 超音速流动和燃烧的模拟	(333)
6.1 紊流模型	(333)
6.2 数值计算方法	(349)
6.3 有限元法求解可压缩粘性流体流动方程	(389)
6.4 超音速燃烧流场数值模拟	(403)
参考文献	(418)
主要符号表	(425)
索引	(429)

第一章 多组分气相粘性反应流动

燃烧是气体、液体和固体燃料与氧化剂之间进行的一种剧烈的化学反应。无论哪一种燃料的燃烧,化学反应总是全部地或部分地在气相中进行,一般情况下燃烧是在流动系统中发生,在燃烧室中气流都是由多种化学性质不同的组分所组成。例如,在未燃的气相气流中至少有三种组分,即:可燃物质(如碳氢燃料);氧化剂(如氧气)和不参加化学反应的惰性气体(如氮气)。在已燃气流中,如果燃烧完全,则没有燃料或没有氧气,但有燃烧产物;如果燃烧不完全,则燃料、氧气和燃烧产物同时存在。这是常见的气流,这种气流的特点是:除开有粘性外,还有各组分之间相互扩散和燃料与氧气之间的化学反应;存在质量交换过程和化学反应过程。因此研究燃烧问题就是研究多组分的带化学反应的流体力学问题,研究燃烧过程中出现的质量、动量和能量输运现象。当气流雷诺数较低时,常出现层流流动,本章主要讨论层流情况。但当雷诺数大于15000时,就会产生紊流。

1.1 质量交换

质量交换是由于分子(或紊流气团)之间相互扩散而产生的混气成分的变化,本节主要讨论分子的扩散。

1.1.1 定义

(1) 混气密度 ρ \equiv 单位体积内混气的质量, (kg/m^3)。

(2) 组分 \equiv 混气中化学性质不同的物质,如 H_2O , H_2 , CO , O_2 等。

(3) 混气中 s 组分的密度 ρ_s \equiv 单位容积中组分 s 的质量, ($\text{kg}/$

m³)。

(4) s 组分的质量分数 $m_s = s$ 组分的质量相对浓度 $= \rho_s / \rho$ 。其中

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 + \rho_3 + \cdots = \sum_s \rho_s$$

故

$$\sum_s m_s = m_1 + m_2 + m_3 + \cdots = 1$$

(5) 混气的总质量流 $G \equiv$ 质量流量 \equiv 单位时间内通过单位面积(与指定方向垂直)的混气质量 $= \rho u$ [kg/(m² · s)]。

(6) s 组分的质量流 $G_s \equiv$ 单位时间内通过垂直指定方向上单位面积的组分 s 的质量 $= \rho_s u_s$ 。其中

$$G = G_1 + G_2 + G_3 + \cdots = \sum_s G_s$$

(7) s 组分的对流质量流(或对流量) $G_{c,s} = G m_s$, 即

$$\sum_s G_{c,s} = \sum_s G m_s = G$$

(8) s 组分的扩散质量流(或扩散通量) $G_{d,s}$:

$$G_{d,s} = G_s - G_{c,s}$$

则

$$\sum_s G_{d,s} = G_{d,1} + G_{d,2} + G_{d,3} + \cdots = 0$$

这意味着通过单位面积各组分扩散流的总和为零, 即扩散流的总和 对混气整体运动没有影响。

(9) 混气的速度(在指定方向):

$$u = G / \rho = \sum_s \rho_s u_s / \rho$$

1.1.2 输运定律和输运系数

1. 费克扩散定律

由实验得出的费克(Fick)定律为

$$G_{d,s} = - \Gamma_s \frac{\partial m_s}{\partial x} \quad (1.1)$$

式中, Γ_s 是混气中 s 组分的交换系数(或称输运系数), x 是沿 G 流通方向上的距离, 式中梯度前的负号表示物质从高浓度向低浓度扩散, $\Gamma_s = D_s \rho$, D_s 为 s 组分在混气中的扩散系数, Γ_s 的因次为 $\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s})$, D_s 的因次为 m^2/s 。扩散系数不仅与各组分的组成与浓度有关, 还与扩散时压力和温度有关。在计算中, 为了简便, 一般不加考虑, 即设 $D_1 = D_2 = \dots = D_s = D$ 。Fick 定律是近似的, 实际上温度梯度、压力梯度以及其他组分梯度, 都可能引起 s 组分扩散, 但在一般情况下这些因素引起的扩散量较小。

2. 导热定律

多组分气体的导热的热流与单组分气体不同, 它除了由于温度梯度所产生的热流外, 还应考虑各组分扩散物质流所带入或带出的焓(包括化学焓), 因此多组分气体导热可用修正的傅里叶(Fourier)定律来描述:

$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_s \rho_s u_s h_s$$

式中, λ 为混合气的导热系数, $\text{J}/(\text{s} \cdot \text{m} \cdot \text{K})$, 可按混气成分来计算;

h_s 为 s 组分的焓;

u_s 为 s 组分在 x 方向上的扩散速度, m/s ;

q 为单位时间内通过单位面积的热流, $\text{J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2)$ 。

3. 输运系数之间关系

在燃烧现象中, 质量输运、动量输运、能量输运往往是同时存在, 它们之间有一定的内在联系, 这些关系可以组合成三个无量纲数。

动量和热量输运之间关系, 可用运动粘性系数 ν 和热扩散系数 a 的比值来描述, 称为普朗特数(Prandtl Number):

$$Pr = \frac{\nu}{a} = \frac{\mu/\rho}{\lambda/C_p \rho} = \mu C_p / \lambda$$

普朗特数 Pr 表示了动量和热量输运相对难易程度, 不同气

体 Pr 都为 0.7 左右,而且温度和压力的变化对其影响不大,因此计算中,为了简化,可通过粘性系数 μ 和 Pr 来确定导热系数。

动量和质量输运之间关系,可用施密特数(Schmidt Number)来表示:

$$Sc = \frac{\nu}{D} = \mu/\rho D$$

通常,可用 Sc 来表示动量和质量输运相对难易程度,对于一般混合气体, $Sc \approx 0.8$,因此扩散系数 D 可通过粘性系数和 Sc 来确定。

路易斯数(Lewis Number)是热扩散系数和扩散系数比值

$$Le = \frac{Sc}{Pr} = \frac{\alpha}{D} = \rho DC_p/\lambda$$

在大部分混合气体中, Le 接近于 1。

在实际燃烧过程中, Pr, Sc 和 Le 都随混气的组成、温度和压力的变化,但这三个无量纲数都很接近于 1。通常在燃烧理论分析中,假设它们都等于 1。这近似关系不仅简便,而且很有用。

1.1.3 混气的质量守恒方程(扩散方程)

这里按直角坐标系推导一元流的守恒方程,设混气中 s 组分由于化学反应,使其密度 ρ_s 随时间和距离而变化,又设 R_s 为单位容积内组分 s 因化学反应而得的生成速率, $R_s = \nabla \cdot (\rho_s v_s)$,单位为 $\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ 。在沿着 x 轴流动方向上取一控制体积,如图 1.1 所示。

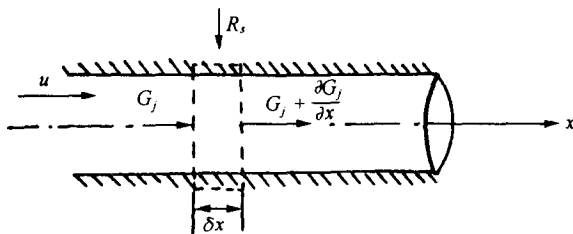


图 1.1 一元流动简图

按质量守恒原理,流入的质量流量减去流出的质量流量加上生成速率应等于控制体内密度的增长率,用数学式表示:

$$G_s - (G_s + \frac{\partial G_s}{\partial x} \delta x) + R_s \delta x = \frac{\partial \rho_s}{\partial t} \delta x$$

由此可得出 s 组分的质量守恒方程,即

$$-\frac{\partial G_s}{\partial x} + R_s = \frac{\partial \rho_s}{\partial t} \quad (1.2)$$

又因为

$$\begin{aligned} G_s &= \rho_s u_s = \rho_s (u_s - u) + \rho_s u = m_s \rho u + \rho_s (u_s - u) \\ &= m_s G + \rho_s (u_s - u) \end{aligned}$$

式中, $\rho_s (u_s - u)$ 是扩散的质量流通量。费克定律的另一种形式是

$$G_{d,s} = \rho_s (u_s - u) = -\Gamma_s \frac{\partial m_s}{\partial x}$$

故 $G_s = m_s G + \Gamma_s \frac{\partial m_s}{\partial x}$ 。将此式代入式(1.2),可得

$$-\left(G \frac{\partial m_s}{\partial x} + m_s \frac{\partial G}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_s \frac{\partial m_s}{\partial x}\right) + R_s = \rho \frac{\partial m_s}{\partial t} + m_s \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (1.3)$$

令 $s=1$ 到 n , 对上式各项求和, 又因为 $\sum_{s=1}^n m_s = 1$ 和 $\sum_{s=1}^n R_s = 0$ (化学反应中质量守恒), 则可得出

$$\frac{\partial G}{\partial x} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (1.4)$$

利用式(1.4)可将式(1.3)简化为

$$\rho \frac{\partial m_s}{\partial t} + G \frac{\partial m_s}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_s \frac{\partial m_s}{\partial x}\right) + R_s \quad (1.5)$$

在三维流动中, m_s 在三个方向上都有梯度, 假设交换系数(或扩散系数 D_s) 各向同值, 则质量守恒方程可写为

$$\rho \frac{Dm_s}{Dt} = \nabla \cdot (\Gamma_s \nabla m_s) + R_s \quad (1.6)$$

式中, R_s 为源项。对整个混气而言, 连续方程仍然是

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

对于稳态流动, $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$, 故 $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$, 这意味着 G 不随时间和空间而变, 所以稳态流动的质量守恒方程可写为

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} m_s) = \nabla \cdot (\Gamma_s \nabla m_s) + R_s \quad (1.7)$$

1.2 混气流动的动量方程和能量方程

1.2.1 动量方程

假设气流是稳态的, 则混气的动量守恒方程在形式上与单组分气体完全一样, 可写为

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \nabla \cdot \{ \mu_m [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \} - \nabla P \quad (1.8)$$

式中, μ_m 为混气的粘性系数, 按成分计算。

1.2.2 能量方程

1. 定义

对于有化学反应的混气而言, 各组分的静焓可表示为

$$h_s = \int_{T_0}^T C_{p,s} dT + h_{s,0} \quad (\text{J/kg})$$

式中, $C_{p,s}$ 为 s 组分的等压比热, $h_{s,0}$ 为温度 T_0 时组分 s 的焓值(可代表化学能), 因此混气的静焓为

$$h = \sum_s m_s h_s = \sum_s m_s \int_{T_0}^T C_{p,s} dT + \sum_s m_s h_{s,0} \quad (\text{J/kg 混气}) \quad (1.9)$$

设 $C_p = \sum_s m_s C_{p,s} = \frac{1}{\rho} \sum_s \rho_s C_{p,s}$, 其中 C_p 为混气平均等压比热, 则

$$h = C_p (T - T_0) + \sum_s m_s h_{s,0}$$

式中, T_0 可选为 0, $h_{s,0}$ 有时也可定为 0。设燃料与氧化剂进行化学反应时, 混气的静焐为 $\sum m_s h_{s,0} = m_{fu} h_{fu,0} + m_{ox} h_{ox,0} + m_{pr} h_{pr,0}$, 一般 $h_{ox,0}$ 和 $h_{pr,0}$ 都可定为 0, 而 $h_{fu,0} = H_{fu}$, 则可认为

$$\sum_s m_s h_{s,0} = m_{fu} H_{fu} \quad (1.10)$$

式中, m_{fu} 为燃料的质量相对浓度, H_{fu} 为燃烧热 (J/kg 燃料), 静焐的简化表达式为

$$h = C_p T + m_{fu} H_{fu} \quad (\text{J/kg 混气})$$

混气总焐为

$$\tilde{h} = C_p T + m_{fu} H_{fu} + u^2/2 \quad (\text{J/kg 混气})$$

2. 守恒方程

为了方便, 先假设气流为一元流动 (如图 1.2 所示)。图中, E = 加入控制体的能量 = 输入热流量; $E + dE$ = 输出热流量, J/($\text{m}^2 \cdot \text{s}$); $E = Q + W_s + Gu^2/2 + \sum G_s h_s$; $Q = -\lambda_m (dT/dx)$, λ_m 为

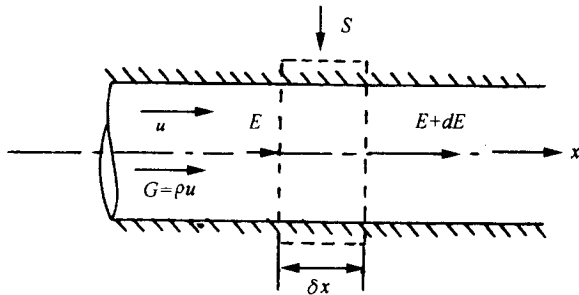


图 1.2 一元热流量分析

混气导热系数; 表面应力在 x 方向做的功 $W_s = (\tau_{ij} \cdot \mathbf{u})_x$, $\text{Nm}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$; $\sum G_s h_s$ 为静焐的流量, $\text{J}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ 。

根据热力学第一定律可知, 当外界对微元体的辐射热流为 S

[J/(m³·s)]时:

$$E + S \cdot dx = E + \frac{dE}{dx} dx$$

可得

$$S = \frac{dE}{dx} = -\frac{d}{dx}(\lambda_m \frac{dT}{dx}) + \frac{dW_s}{dx} + G \frac{du^2/2}{dx} + \frac{d}{dx}(\sum_s h_s G_s) \quad (1.11)$$

式中最后一项为混气焓的流通量随 x 的变化率,可写为

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}(\sum_s h_s G_s) &= \sum_s (G_s \frac{dh_s}{dx}) + \sum_s (h_s \frac{dG_s}{dx}) \\ &= \sum_s [h_s \frac{\partial}{\partial x}(Gm_s + G_{d,s})] + \sum_s (\rho_s u_s \frac{\partial h_s}{\partial x}) \end{aligned}$$

按前节中定义,可知

$$G = \rho u = \sum_s \rho_s u_s = u \sum_s \rho_s, \text{ 则上式可改写成}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}(\sum_s h_s G_s) &= \sum_s h_s [G \frac{dm_s}{dx} - \frac{d}{dx}(\Gamma_s \frac{dm_s}{dx})] + \rho u \sum_s m_s \frac{dh_s}{dx} \\ &= G \frac{d}{dx}(\sum_s m_s h_s) - \frac{d}{dx} \sum_s h_s \Gamma_s \frac{dm_s}{dx} \end{aligned} \quad (1.12)$$

又因总焓定义为

$$\tilde{h} = \sum m_s h_s + \frac{1}{2} u^2$$

则

$$G \frac{\partial(u^2/2)}{\partial x} = -G \frac{d}{dx}(\sum_s m_s h_s) + G \frac{d\tilde{h}}{dx} \quad (1.13)$$

把式(1.12)和(1.13)代入式(1.11),可得

$$S = -\frac{d}{dx}(\lambda_m \frac{dT}{dx}) + \frac{dW_s}{dx} + \rho u \frac{d\tilde{h}}{dx} - \frac{d}{dx} \sum_s h_s \Gamma_s \frac{dm_s}{dx} \quad (1.14)$$

根据总焓定义

$$\frac{d\tilde{h}}{dx} = C_p \frac{dT}{dx} + \frac{d}{dx} \sum_s m_s h_{s,0} + \frac{d}{dx}(\frac{u^2}{2})$$