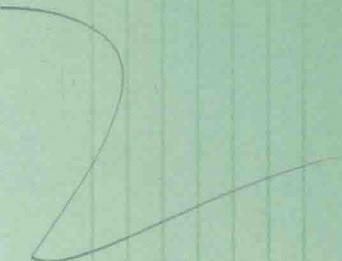
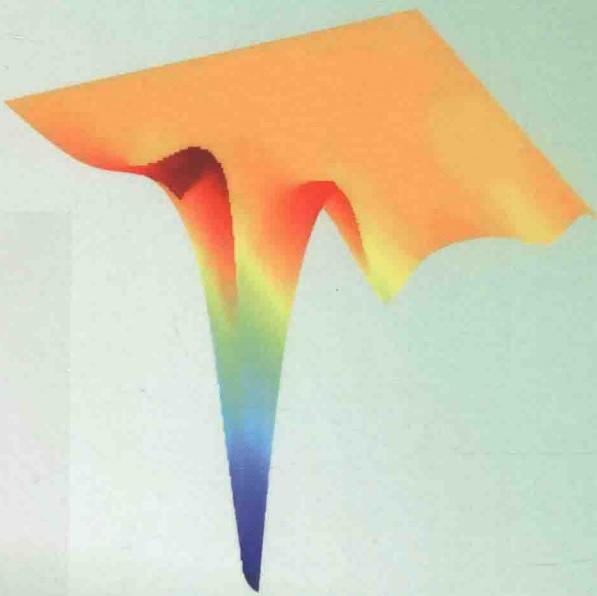


气体放电 数值仿真方法

郑殿春 著

*Numerical Simulation Methods
for Gas Discharge*



科学出版社

气体放电数值仿真方法

郑殿春 著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书在论述气体放电过程带电粒子动力学行为数学模型的同时,详尽阐明了相应的数值仿真方法并给出了仿真计算实例。本书将非线性动力学理论和方法引入气体放电现象的研究领域,通过数值仿真分析挖掘了气体放电过程蕴涵的粒子流混沌现象、放电轨迹的分岔行为、场函数时空演化规律及其相互耦合关系,为气体放电现象的深入探索提供了一种崭新的分析手段。

本书可作为高等院校高电压与绝缘技术专业的研究生教材,也可供从事高电压电介质放电现象研究的科技工作者与高压电气绝缘配合及结构设计的工程师参考。

图书在版编目(CIP)数据

气体放电数值仿真方法 / 郑殿春著. —北京: 科学出版社, 2016.4

ISBN 978-7-03-048108-5

I. ①气… II. ①郑… III. ①放电—计算机仿真 IV. ①O461

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 085808 号

责任编辑: 余 江 张丽花 / 责任校对: 郭瑞芝

责任印制: 徐晓晨 / 封面设计: 迷底书装

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>

北京京华光彩印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2016 年 4 月第 一 版 开本: 720×1000 1/16

2016 年 4 月第一次印刷 印张: 17

字数: 348 000

定价: 88.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前　　言

研究气体放电现象，除了实验方法，数学分析法或称数值仿真方法是重要的研究手段，并可以弥补实验方法的不足。由于计算技术的发展、快速数据处理技术及高清显示技术的进步，使得气体放电数值仿真方法已经成为科技工作者的必备工具。

本书在论述气体放电过程带电粒子动力学行为数学模型的同时，详尽阐明相应的数值仿真方法并且给出计算实例，将非线性动力学理论和方法引入气体放电现象的研究领域。通过数值仿真分析挖掘了气体放电过程所蕴涵的粒子流混沌现象、放电轨迹的分岔行为、场函数时空演化规律及其相互耦合关系，使得原来艰涩难懂的气体放电现象可视化，并使得气体放电电子崩形成、流注生长、放电通道轨迹演化过程的时空行为以图像方式清晰地跃然荧屏画面上，尤其非线性动力学理论的应用，为研究气体放电复杂现象提供了有效的分析方法，也为进一步探索、发现和应用气体放电现象提供了理论依据。

作者依据自身的从教经历、学术背景和科研成果撰写成此书。第1章简要介绍气体放电的研究历程；第2章详细阐述气体放电过程的数学表述；第3章简述气体放电的基本理论；第4章论证 Boltzmann 方程和 Monte Carlo 法数值分析过程，以及确定气体放电参数方法且给出仿真实例；第5章给出基于电子崩理论的气体放电仿真方法；第6章阐述用于气体放电的 FCT 仿真方法；第7章讲述基于流体化学反应模型的空气/SF₆放电仿真方法；第8章分别阐明 PIC 和 MCC 方法，并将其组合应用于纳秒脉冲 SF₆放电仿真分析；第9章对电极介质覆盖气体放电的非线性行为进行理论分析，并给出其分析方法和仿真实例；第10章运用分形几何理论对短气隙放电通道分岔现象进行分析和仿真计算，证明气隙放电通道分岔演化模型的实用性。

本书是作者将数学理论、计算技术与计算机语言密切结合的气体放电数值仿真技术的研究成果，从内容、结构及写作上力求知识系统性、逻辑缜密性、方法可靠性和技术先进性。由于作者的水平有限，书中难免会有纰漏，请同仁不吝赐教。本书的研究内容获得国家自然科学基金项目(No.51077032)资助。

作　者

2015年10月于哈尔滨

目 录

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 气体放电现象研究简要回顾	1
1.2 气体放电过程数值仿真方法	2
1.3 撰写本书的目的	3
参考文献	4
第 2 章 气体放电过程数学表述	5
2.1 连续介质的基本运动方程	5
2.1.1 体积分的物质导数	5
2.1.2 连续方程	7
2.1.3 运动方程	8
2.1.4 能量守恒方程	9
2.2 基于动力学的气体放电过程的数学表述	10
2.2.1 电子的产生、消失及其连续性方程	10
2.2.2 负离子的产生和消失及其连续性方程	13
2.2.3 正离子的产生和消失及其质量方程	13
2.3 中性粒子的质量方程	13
2.3.1 中性粒子的动量输运方程	14
2.3.2 带电粒子的动量输运方程	16
2.3.3 能量输运方程	17
2.4 电磁场方程	19
2.5 气体放电问题的边界条件	21
参考文献	22
第 3 章 气体放电基本理论	23
3.1 汤逊碰撞电离理论	23
3.1.1 电子碰撞电离的 α 过程	23
3.1.2 γ 过程和自持放电条件	24
3.2 流注理论的物理概念	25
3.2.1 光致电离模型	25
3.2.2 Raether 判据	26

3.2.3 Meek 判据	28
3.2.4 流注形成机理	30
3.3 带电粒子在电场中的行为	33
3.3.1 离子在电场中的迁移运动	33
3.3.2 电子在电场中的运动规律	35
3.3.3 电场中电子的速度分布	36
3.4 气体放电过程的复杂性	37
3.4.1 纳秒脉冲下气体放电模型	37
3.4.2 气体放电过程的混沌现象	39
3.4.3 气体放电轨迹分岔现象	40
参考文献	40
第 4 章 气体放电参数确定方法	42
4.1 Boltzmann 方程	42
4.1.1 Boltzmann 数值仿真微分法	43
4.1.2 Boltzmann 仿真积分变换法	45
4.2 Monte Carlo 法	47
4.2.1 Monte Carlo 仿真	48
4.2.2 模型建立	48
4.3 仿真实例	57
4.3.1 电子碰撞概率模型	57
4.3.2 粒子运动过程表述	58
4.3.3 记录数据	61
4.3.4 仿真结果及讨论	61
参考文献	66
第 5 章 基于电子崩理论的气体放电仿真计算	67
5.1 电子崩模型	67
5.2 均匀电场下电子崩发展过程仿真	69
5.2.1 均匀电场下电子崩数学模型	69
5.2.2 仿真计算	69
5.3 相关计算参数的选择	72
5.3.1 电离系数 α 的选取	72
5.3.2 电子漂移速度的选取	72
5.3.3 扩散系数的选取	73
5.4 计算结果	74
5.4.1 空气中电子崩发展过程计算结果	74

5.4.2 SF_6 气体中电子崩发展过程计算结果	76
5.5 计算结果讨论	78
5.6 非均匀电场下电子崩发展过程仿真	79
5.6.1 模拟电荷法	79
5.6.2 空气正针尖电子崩发展过程计算结果	87
5.6.3 空气负针尖电子崩发展过程计算结果	89
5.6.4 SF_6 正针尖电子崩发展过程计算结果	91
5.6.5 SF_6 负针尖电子崩发展过程计算结果	93
5.6.6 结果讨论	95
参考文献	96
第 6 章 气体放电 FCT 仿真方法	97
6.1 气体放电模型	97
6.2 数值仿真 FCT 法	98
6.3 计算实例	103
6.4 均匀电场下 SF_6 及其与 N_2 混合气体放电特性	110
6.4.1 SF_6 正流注放电特性	110
6.4.2 SF_6 负流注放电特性	120
6.5 SF_6/N_2 混合气体放电特性	125
6.5.1 50%-50% SF_6/N_2 正流注放电特性	126
6.5.2 50%-50% SF_6/N_2 负流注放电特性	131
6.5.3 相关讨论	138
参考文献	139
第 7 章 基于流体化学反应模型的空气/SF_6 放电仿真	140
7.1 非均匀场气体放电物理过程	140
7.2 气体放电的化学反应形式	141
7.3 气体放电模型	145
7.3.1 数值模型	146
7.3.2 放电过程的化学反应	147
7.4 空气放电过程仿真分析	149
7.4.1 空气放电仿真模型	149
7.4.2 空气放电特性	149
7.4.3 实验	154
7.5 SF_6 气体放电仿真	158
7.6 相关结论	164
参考文献	165

第8章 纳秒脉冲 SF₆放电 PIC-MCC 仿真	166
8.1 研究现状	166
8.2 气体放电分析方法	167
8.3 PIC-MCC 法	167
8.3.1 PIC 法	168
8.3.2 MCC 法	171
8.3.3 PIC-MCC 算法实现	176
8.4 SF ₆ 电子输运参数	176
8.4.1 碰撞截面对输运参数的影响	177
8.4.2 校正后的电子输运参数	179
8.5 纳秒脉冲下 SF ₆ 放电过程分析	181
8.5.1 纳秒脉冲下 SF ₆ 放电过程	181
8.5.2 初始条件对放电过程的影响	185
8.5.3 结果讨论	194
参考文献	194
第9章 电极介质覆盖气体放电的非线性行为	195
9.1 混沌概念	195
9.1.1 Hopf 分岔	195
9.1.2 混沌现象	195
9.1.3 最大李雅普诺夫指数	196
9.2 大气压短气隙放电模型	197
9.2.1 非电负性气体放电过程表述	198
9.2.2 电负性气体放电过程表述	199
9.2.3 非线性方程的 SG 算法	200
9.3 短气隙放电过程	201
9.3.1 短间隙 N ₂ 放电动力学特性	201
9.3.2 短间隙空气放电动力学特性	208
9.4 大气压短气隙放电的影响因素	212
9.4.1 外施电压幅值对短气隙放电的影响	212
9.4.2 外施电压频率对短气隙放电的影响	215
9.4.3 电介质及间距对气隙放电的影响	218
9.5 电极覆盖短气隙放电的混沌演化	220
9.5.1 准周期道路通向混沌演化	220
9.5.2 倍周期道路通向混沌演化	225
参考文献	229

第 10 章 气体放电轨迹的分岔现象	230
10.1 气体放电经典理论	230
10.1.1 汤逊理论	230
10.1.2 流注理论	231
10.1.3 非均匀电场气隙的击穿	232
10.2 气体放电轨迹与分形	233
10.3 电介质放电过程的分形表征	234
10.3.1 计盒维数	234
10.3.2 计盒维数的计算	234
10.4 基于 WZ 模型的 SF ₆ 放电通道分叉特性	235
10.4.1 数值仿真模型	236
10.4.2 数值计算模型电极结构及求解区域划分	237
10.4.3 数值仿真步骤	237
10.5 数值仿真计算 SF ₆ 放电通道分叉特性	239
10.5.1 发展概率指数 η 对放电通道发展的影响	239
10.5.2 放电阈值场强 E_c 对放电通道发展的影响	241
10.5.3 维持电场 E_s 对放电通道发展的影响	242
10.6 基于改进 WZ 模型的 SF ₆ 放电通道分叉特性	244
10.6.1 短气隙放电通道发展概率模型	245
10.6.2 数值仿真流程图	246
10.7 SF ₆ 放电通道分叉演化过程	248
10.7.1 外施电压对放电通道发展的影响	250
10.7.2 流注区电导率对放电通道发展的影响	253
10.8 短空气隙放电通道分叉特性与实验印证	255
10.8.1 短空气隙放电通道分叉特性	255
10.8.2 短空气隙放电实验	257
10.9 相关讨论	260
参考文献	261
附录	262

第1章 绪论

1.1 气体放电现象研究简要回顾

气体放电是研究带电粒子在电场中运动规律及应用的科学。自 1672 年 Gottfrid Wilhelm 在旋转硫磺球上发现了人工条件下的电火花，由此揭示了“气体放电”的奥秘。1802 年彼得洛夫(В.В.Лелров)发现了电弧放电。1889 年，巴申通过实验获得均匀电场的击穿电压 U 是气压 p 与极间距离 d 乘积(pd)的函数，并发现存在一个最小击穿电压 U_{\min} 。1903 年，汤逊提出了气体击穿的碰撞电离理论并于 1910 年给出气体击穿的判据。1939 年，Raether 用云雾室对气体放电现象进行了研究，并给出了气体放电流注理论。除了巴申定律、汤逊放电理论，许多学者还从微观和统计学的角度对气体放电机理进行研究，揭示了描述带电粒子在电场中的运动规律。继 Loeb 总结了五六十年代气体放电的研究成果之后，Meek 对 70 年代的气体放电研究成果也进行了归纳提炼，建立了气体放电过程电子崩发展的数学模型，为气体放电现象的理论研究和数值分析奠定了基础。由于激光技术的发展和应用，许多研究者采用汤逊脉冲法(PT)测量了气体预放电参数，极大地促进了气体放电现象的研究并拓宽其应用领域。在此期间，Franklin 提出了气体及电负性气体放电过程中电子崩发展过程参数模型，而 Verhaart 等建立了表述气体放电过程的四参数模型。

20 世纪 80 年代初，由 Kunhardt 等提出了一种适合于高气压、高电压的气体放电模型——逃逸电子模型。此外，Davies 为描述空气放电的等离子体过程提出了流体模型。Passchier 等将粒子迁移-扩散过程进行了简化近似，采用流体分析方法，模拟了平板电极之间的空气放电过程。Zhang 和 Adamiak 运用了一种动力学模型，对棒-板电极结构的电晕放电进行研究。Boeuf 采用流体模型对射频气体辉光放电特性进行了研究。Zhuang 采用流体动力学的漂移-扩散方程对针-栅电极负电晕进行模拟研究。Bonaventura 结合光发射，通过模拟电场、电子密度及发射光子量对球-板电极空气负流注放电进行了实验研究。Papageorgiou 采用三维流体模型并利用 Helmholtz 方程描述光电离过程，模拟了板-板均匀场气体放电过程。Tran 模拟了针-板空气负流注放电特性。Morrow 对 SF₆ 气体流注放电特性及流注放电通道特征进行了分析研究。仲伟涛通过数值模拟及实验对短间隙空气和 SF₆ 放电过程进行了研究。洪川通过有限元法模拟计算了脉冲电压下棒-板长间隙气体放电过程。

由于实验检测技术的进步，气体放电现象研究更加深入。Jaworek 对针-板电

极空气、N₂ 和 CO₂ 三种气体放电现象进行了实验研究，获得了电晕放电特性并记录了气体放电过程的电弧形貌图像。Sewraj 对氮气介质阻挡放电进行了电气和光谱分析，测得起始和熄灭电压，并利用所得到的氮气光谱信息分析了放电过程中各粒子间能量转移进程。Briels 等利用超高速相机对空气和 N₂-O₂ 混合气体 (N₂ : O₂=99.8 : 0.2) 中流注放电过程分别进行了拍摄，通过拍摄到的图片分析了流注放电过程中的分岔情况。Nijdam 等通过 ICCD 相机对纯氮气、纯氧气、氮氧混合气体以及氩气中流注放电过程分别进行了信息采集。此外，日本学者 Ryo 等在研究臭氧产生机理过程中，利用 ICCD 拍摄了一组流注触发、发展过程图像。邵涛等对空气介质进行绝缘特性实验，测得不同间隙、电压幅值和频率下的击穿电压、击穿电流、击穿时延等参数。李寿哲等对氩气和氮气放电发射光谱进行了诊断，测定放电过程气体温度与振动温度随外界条件的变化规律。本书作者的研究团队对空气放电光谱信息进行了分析，发现了其放电过程的光谱强度、带电粒子浓度与外施电场强度之间的关系，并建立了一维自治流体力学的气体放电模型，数值仿真了大气压下气体放电过程间隙电场、粒子密度及其动力学特性的时空分布。

1.2 气体放电过程数值仿真方法

随着计算机技术和数值计算方法的不断发展，气体放电的数值模拟研究得到了空前的发展。由于有了精度高、快速收敛的数值计算法，在气体放电研究领域中数值模拟发挥着越来越重要的作用。

目前，常用的数值模型包括：流体动力学模型、蒙特卡罗 (Monte Carlo) 动理学模型、Boltzmann 方程求解的动理学模型和粒子动理学模型，以上模型都是在耦合泊松方程的条件下用来模拟放电发展过程和带电粒子输运特性的。

流体动力学模型将气体放电过程中各带电粒子在运动过程中的不平衡问题充分考虑进去，对气体的放电特征做出描述，而且场域能够自治，求解容易便捷。

Boltzmann 方程求解的动理学模型是一种先对物质的结构进行假设，利用一定的数学方法和统计物理学理论，通过对单个粒子的运动分析，进而推导得出大量粒子运动的统计平均结果的方法，气体放电中的电子能量分布函数通过求解 Boltzmann 方程得到，能够给出不同种类粒子具体的动理学特性信息，对此过程做出比较合理的描述。但是对重粒子的反应过程进行了较大的简化，忽略了中间态的过程。Boltzmann 求解过程中要处理非常复杂的多维相空间，进行数值求解时往往计算量较大，求解过程中需要进行较大的近似。

蒙特卡罗 (Monte Carlo) 模型是一种随机抽样统计的方法，可以在研究气体放电时，从微观角度描述其特性，跟踪粒子轨道，各粒子在电场中获得和损失的能量被充分考虑进去，从而准确地将放电过程中粒子间的相互碰撞情况描述出来。

蒙特卡罗模型不仅比流体动力学模型在数学计算上简单，还能模拟出粒子的运动过程。但是需要跟踪大量的粒子才能更准确地描述气体放电过程，如此数值处理的工作量非常大，需要相对较长的时间来计算。粒子模型在自治场及外加电磁场中统计平均被跟踪的大量带电微观粒子的运动情况，从而取得放电过程中各类粒子的宏观特性。放电中的初始粒子分布要加权到空间网格，电场分布是利用麦克斯韦方程求解得到的。结合 Newton-Lorentz 方程跟踪粒子，采用合理的边界条件，模拟气体放电过程。但是此模型需要消耗大量的时间进行运算，不适于用来模拟分析化学反应复杂的气体放电过程。

上述模型虽然能够较好地描述气体放电过程，但仍存在某些局限性。随着气体放电机制研究的深入，一些研究者提出了气体放电混合模型，如粒子模型与蒙特卡罗模型混合的 PIC-MCC (Particle-In-Cell Monte Carlo Collision) 模型和流体动力学模型与 Boltzmann 方程混合的新型流体模型 (FD-BM)。而非线性科学的发展给气体放电现象的研究注入活力，为揭示气体放电复杂性提供了新思维和研究手段。

1.3 撰写本书的目的

经典理论解释了气体放电现象以及工程应用的技术问题，随着应用领域的拓展和研究的深入，需要更有效的实验手段和分析方法。

气体放电过程的复杂性，源于其电极结构的多样性、激励源的多样性、气体介质的多样性、参与放电粒子运动的不确定性、放电环境条件的多样性以及数学微分方程(模型)的非线性。若要探索气体放电过程的复杂性，则必须研究其数学微分方程非线性行为特性。在许多气体放电实验探索过程中，研究人员往往不知道系统变量相互作用的具体规律，但仍希望借助于已有的知识，特别是某些变量随时间变化的规律来建立放电系统的动力学微分方程。研究人员及科学工作者希望将这种微分方程(模型)的解与实验结果进行比较以印证模型的正确性，同时也希望由此微分方程推断出其他有意义的规律。

非线性的实质是事物之间的相互作用，非线性的基本特点是产生多样性和多尺度性，而非线性研究的最有效工具是数学仿真方法。数学仿真 (mathematical simulation) 是以数学微分方程为基础的数值仿真方法，它是用数学微分方程刻画被仿真的对象。虽然气体放电数值仿真涉及数学、物理、计算科学以及高级语言编程和计算机应用等学科，但是气体放电数值仿真方法已经成为此领域研究工作者重要的分析手段，也是研究生课程的重要教学内容。鉴于研究生教学需要和科研成果积累、总结归纳和提炼，作者撰写了此书，可供相关研究人员参考，也可以作为相关专业的研究生教材使用。

参 考 文 献

- 徐学基. 1996. 气体放电物理[M]. 上海: 复旦大学出版社.
- 杨津基. 1983. 气体放电[M]. 北京: 科学出版社.
- 张连星. 2011. 大气压下短气隙放电过程分析[D]. 哈尔滨: 哈尔滨理工大学.
- 张仲麟. 2012. 电极覆盖 SF₆ 短气隙放电的时空演化行为分析[D]. 哈尔滨: 哈尔滨理工大学.
- 郑殿春. 2012. 绝缘结构电场分析有限元法与应用[M]. 北京: 科学出版社.

第2章 气体放电过程数学表述

气体放电过程固然是一个涉及物质结构各个层次的复杂运动，有它的特殊运动规律，但是作为物质运动的具体形式，总应当遵循物质运动的普遍规律，如经典力学、热力学、统计物理学、量子力学的规律。这些规律中主要有物质不灭、动量守恒、角动量守恒、能量守恒等，这些规律的原则形式已为人们所掌握。

从基本物理定律出发，对放电过程进行具体分析，给出气体放电过程所应遵循的运动规律及其相应的数学表述，对于认知气体放电本质具有理论意义和实用价值。

2.1 连续介质的基本运动方程

连续介质力学是将物质看成连续的，而不计实物粒子之间的不连续性。要满足这一条件，则必须要求在我们所感兴趣的最小体积，即通常所谓的“体积元”中，或所谓“无限小”体积中仍含有大量粒子，即我们只研究物理意义上的无限小体积的行为，意即这“无限小体积”与物体的宏观度量相比是很小的，微不足道的，但是却仍含有大量粒子。因此，相对于粒子及粒子间的距离而言又是很大的。在下面的分析推导过程，将把由大量粒子组成的“物理无限小”体积当成一个质点而不计质点内部粒子的运动行为。

如果将某些指定的物质当成一个系统，则这个系统可以由多种成员（谓之组元）组成，尽管这些组元之间可以互相转化，系统的体积也可变化，但是它们总的的质量却是守恒的。对此系统中一给定的体积 V ，设其界面为 S ，体积 V 中系统总物质的变化只能是由于组成这个系统的物质穿出或穿入了界面 S 。当然对组成这个系统的各个组元而言，由于各组元之间可以互相转化，所以即使没有粒子穿越界面，组元物质还是可以发生增减的。换言之，总的的质量是无源无汇的，但对各个组元而言，却是有源有汇的。

2.1.1 体积分的物质导数

如果位置空间区域 $V(X,t)$ 由一给定的物质系统占有，其中 X 表示 V 中的空间坐标， t 为时间变量， $A(X,t)$ 是定义在 V 上的连续可微函数，可以得到 $A(X,t)$ 在 V 上的积分，即

$$I(t) = \int_V A(X,t) dX \quad (2-1)$$

式中， $X = [X, Y, Z]^T$ ，为 V 中的点坐标。

假定由物质运动造成所占的体积由 t 时间的 V 变成 $t + \Delta t$ 时刻的 $V' = V + \Delta V$ ，这时 $I(t)$ 也会随时间变化，根据导数的定义可以推得 $\frac{dI(t)}{dt}$ 称为 $A(X, t)$ 的物质导数，即

$$\begin{aligned}\frac{dI(t)}{dt} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\int_{V'} A(X, t + \Delta t) dV - \int_V A(X, t) dV \right] \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\int_{V+\Delta V} A(X, t + \Delta t) dV - \int_V A(X, t) dV \right] \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left\{ \int_V [A(X, t + \Delta t) - A(X, t)] dV + \int_{\Delta V} A(X, t + \Delta t) dV \right\} \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_V \frac{1}{\Delta t} \cdot \frac{\partial A(X, t)}{\partial t} \cdot \Delta t dV + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{\Delta V} A(X, t + \Delta t) \cdot \frac{1}{\Delta t} dV \\ &= \int_V \frac{\partial A(X, t)}{\partial t} dV + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{\Delta V} A(X, t + \Delta t) \cdot \frac{1}{\Delta t} dV \quad (2-2)\end{aligned}$$

体积 ΔV 可以看成是由于界面 S 以速度 $V(X, t)$ 运动在 Δt 时间内所扫过的体积，即 $\Delta(\Delta V) = V \cdot \Delta S$ 。

$\Delta V = \oint_S \Delta t \cdot V \cdot dS$ ，即 $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta V}{\Delta t} = \frac{dV}{dt} = \oint_S V \cdot dS$ ，考虑到积分中值定理，在 $(t, t + \Delta t)$ 中存在一点 t_ξ ，使 $\int_{\Delta V} A(X, t + \Delta t) \cdot \frac{dV}{dt} = A(X, t_\xi) \int_{\Delta V} \frac{dV}{dt}$ 成立，并将 $\frac{dV}{dt} = \oint_S V \cdot dS$ 的关系式代入式(2-2)，再求极限得

$$\frac{dI(t)}{dt} = \int_V \frac{\partial A}{\partial t} dV + \oint_S A(X, t) V \cdot dS \quad (2-3)$$

显见，物质导数是含参量积分对参量 t 的导数值。

利用奥高公式可以写出式(2-3)的其他几种形式，如

$$\begin{aligned}\frac{dI(t)}{dt} &= \int_V \frac{\partial A}{\partial t} dV + \int_V \nabla \cdot (AV) dV \\ &= \int_V \left[\frac{\partial A}{\partial t} + \nabla \cdot (AV) \right] dV \quad (2-4)\end{aligned}$$

$$= \int_V \left(\frac{\partial A}{\partial t} + A\nabla \cdot V + V \cdot \nabla A \right) dV \quad (2-5)$$

$$= \int_V \left(\frac{dA}{dt} + A\nabla \cdot V \right) dV \quad (2-6)$$

式中

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial X} \frac{dX}{dt} + \frac{\partial A}{\partial Y} \frac{dY}{dt} + \frac{\partial A}{\partial Z} \frac{dZ}{dt}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial X} V_x + \frac{\partial A}{\partial Y} V_y + \frac{\partial A}{\partial Z} V_z \\
 &= \frac{\partial a}{\partial t} + (\nabla A) \cdot V
 \end{aligned} \tag{2-7}$$

式中， V_x, V_y, V_z 分别为速度 \bar{V} 在 x, y, z 方向的分量。

如果采用曲线坐标也有相应形式，则只要将曲线坐标中算子 ∇A 的表达式代入。式(2-3)~式(2-7)是物质导数的不同表示形式，在下面连续方程(质量守恒方程)、动量守恒方程及能量守恒方程中将经常用到。

2.1.2 连续方程

连续方程是物质不灭定律的数学表述。对于给定的物质，不管其组分如何，而将这些指定的物质总体当成一个系统。设其密度为 $\rho(X, t)$ ，这些物质所占的体积为 V ，则其物质总量 $m(t)$ 为

$$m(t) = \int_V \rho(X, t) dV \tag{2-8}$$

根据物质不灭定律， $m(t)$ 在任何时刻都应为常数，即事实上 $m(t) = m$ 不因时间而变，故其物质导数为 0，即 $\frac{dm}{dt} = 0$ ，由式(2-4)可以写为

$$\frac{dm(t)}{dt} = \int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) \right] dV \equiv 0 \tag{2-9}$$

自然，式(2-9)描述了指定的物质总量不因时而变的守恒性质。

若式(2-9)对任意体积 V 均成立，只能是式(2-9)中的被积函数为 0，即

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0 \tag{2-10}$$

这就是质量守恒定律的微分形式，通常称为连续性方程。质量守恒方程还可以写成粒子数 N 守恒的形式，将式(2-10)两边同时除以粒子质量，即

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla \cdot (NV) = 0 \tag{2-10'}$$

再进一步，在总质量不变的前提下研究各组分质量的变化。这时，各组分质量变化的唯一原因只能是各组分相互转化的化学变化(从物质类别发生了变化这一点上称为化学变化)。假定一个系统由 n 种组分组成，在这些组分中可以产生 r 种化学变化。设第 k 种组分 ($k=1, 2, \dots, n$) 因第 j 类化学反应 ($j=1, 2, \dots, r$) 的产生率是 $V_{kj} J_j$ ，故第 k 种物质总的产生率为 $\sum_{j=1}^r V_{kj} J_j$ ，这就是第 k 种组元的连续性方程源的汇项。因而对第 k 种组元来说，其连续性方程应为

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k V_k) = \sum_{j=1}^r V_{kj} J_j \quad (2-11)$$

如上所述，这 n 种物质总质量应当守恒，有

$$\sum_{k=1}^n \frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \sum_{k=1}^n \nabla \cdot (\rho_k V_k) = \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^r V_{kj} J_j \quad (2-12)$$

即

$$\sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^r V_{kj} J_j = 0 \quad (2-13)$$

2.1.3 运动方程

牛顿运动定律指出：在一个惯性参考坐标系中，物质动量关于时间的变化率等于作用在物质上的合力，即作用力是物质动量变化的原因。为计算和分析问题方便，可将作用力分为体积力和表面力两类。

仍令某些指定物质所占据的体积为 V ， V 的边界为 S ，体积元 dV 内的物质量为 $\rho(X, t)dV$ ， $\rho(X, t)dV$ 的运动速度为 $V(X, t)$ ，则由积分可算出这些给定物质所具有的动量 ϕ 为

$$\phi = \int_V \rho V dV \quad (2-14)$$

作用在这些给定物质 m 上的合力应是体积力和表面力之和。设体积力密度矢量为 $F(X, t)$ ，表面力的面密度张量为 $T(X, t)$ ，则作用于 m 上的合力可写为

$$\int_S T \cdot dS + \int_V F dV \quad (2-15)$$

根据动量变化率 $\frac{d\phi}{dt}$ 和作用率相等的关系，可得

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V \rho V \cdot dV = \int_S T \cdot dS + \int_V F dV \quad (2-16)$$

根据式(2-3)～式(2-6)、式(2-15)和奥高公式，可将式(2-16)写为

$$\int_V \left[\frac{\partial(\rho V)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V V) \right] dV = \int_V (\nabla \cdot T + F) dV \quad (2-17)$$

和

$$\frac{\partial(\rho V)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V V) = \nabla \cdot T + F \quad (2-18)$$

式(2-17)、式(2-18)即是运动方程的积分形式和微分形式。由于我们所研究的对象通常可视为理想气体，没有黏滞作用发生，所以 T 是一对角张量。

如果再进一步区分组成气体的各种组元，依同样方法可写出第 k 种组元的运动方程为

$$\frac{\partial(\rho_k V_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k V_k V_k) = \nabla \cdot T_k + F_k \quad (2-19)$$