

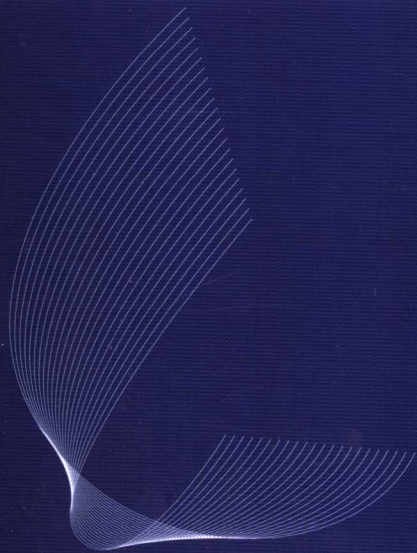
研 究 生 教 学 用 书

.....

Applied Mathematical Analysis
in Chemical Engineering

化工应用数学分析

王金福 编著



化学工业出版社

研究生教学用书

化工应用数学分析

Applied Mathematical Analysis
in Chemical Engineering

王金福 编著



化学工业出版社

· 北京 ·

图书在版编目 (CIP) 数据

化工应用数学分析/王金福编著. —北京: 化学工业出版社, 2006. 7

研究生教学用书

ISBN 7-5025-8728-4

I. 化… II. 王… III. 化学工程-数学分析
IV. TQ011

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 075904 号

研究生教学用书

化工应用数学分析

王金福 编著

责任编辑: 徐雅妮 陈 丽

文字编辑: 汲永臻

责任校对: 洪雅姝

封面设计: 尹琳琳

*

化学工业出版社出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

购书咨询: (010)64982530

(010)64918013

购书传真: (010)64982630

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

大厂聚鑫印刷有限责任公司印刷

三河市延风装订厂装订

开本 787mm×1092mm 1/16 印张 23¼ 字数 626 千字

2006 年 9 月第 1 版 2006 年 9 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-8728-4

定 价: 45.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

前 言

近半个世纪以来，化学工业和化学工程科学取得了前所未有的辉煌成就。化工学科的发展，已经使其成为石油化工、能源、环境、材料等诸多产业领域的科学与技术基础。正如近代哲学家卡尔·马克思所讲过的：“一门科学，只有成功地运用数学时，才算是达到了真正完善的地步”，化学工程科学也正在逐步走向成熟和完善。目前，化工领域新技术、新工艺、新设备的研究和开发无不依靠数学理论的指导和计算科学的支撑，甚或化工研究中的一些创新概念往往也需要数学理论加以抽象和把握。数学在化工应用研究及工程技术开发中的重要性是不言而喻的。

为了加强研究生阶段化工相关专业的工程数学教学，满足广大研究生尤其是博士研究生在学位论文研究中对工程数学知识的需要，清华大学化工系于2005年为化工相关专业的研究生开设了“化工数学分析”一门课，取得了良好的教学效果。该课旨在提高学生利用数学理论和方法分析问题和解决问题的能力，结合化工专业数学的特点，合理取舍课程内容，重点讲解数学方法。该课程具有以下特色：(a) 以工程数学为基础，以化工过程为对象；(b) 以学位论文研究中的数学问题为重点；(c) 以数学分析为主，重在方法学习。

本书是在“化工数学分析”课讲义的基础上，根据作者二十多年来在化工领域从事科学研究和教学实践过程中对化工工程数学的理解和认识，经进一步扩充和完善而写成。本书的特点是专业针对性强，工程数学知识面宽，理论联系化工实际。书中内容既包含了与工程数学相关的基础知识，还包含了与化工基础“三传一反”相关的各类微分方程及微分方程组的求解分析方法。本书既可用作化工相关专业研究生化工数学类课程的教材，又可作为化工领域的工程技术人员及科研人员在学位论文研究和工程技术研发过程中的参考书，同时也是化工领域常用工程数学分析方法的一本手册。

本书内容共分为十章。前五章为工程数学的基础知识部分，包括化工数学模型、微分方程概论、场论初步、复变函数、积分变换；后五章专门讨论与化学工程学科密切相关的各类常微分方程及常微分方程组、偏微分方程及偏微分方程组的求解方法，在介绍各类微分方程求解方法的同时穿插介绍工程数学中关于数理

方程、特殊函数、变分法等的基本概念。书中各章均有适量的习题（习题详解可由编者或出版社责任编辑免费提供），以帮助读者理解基本概念和基本方法。书末附有积分变换表、特殊函数、参数估值算法框图等和习题参考答案，以供读者查阅使用。

本书作为研究生教材，讲授书中全部内容约需 64 学时。如将第 2 章、第 3 章和第 10 章作为自学内容，其它章节在内容上适当删减，也可以在 32 学时内完成主要内容的教学。

本书在编写过程中，得到了清华大学化工系领导的支持和鼓励，助教博士生高继贤为大部分章节配备了习题，博士后王铁峰、杨光育等参与了书稿的校审并提出不少建设性的意见，同时还得到了同事、家人的鼓励和支持，作者对此表示由衷的感谢。本书在编写过程中，参考了大量的文献，在此对参考文献的作者表示谢意。另外，还要特别感谢试用本书初稿的清华大学化工系 2005 级的研究生同学，正是他们在课堂上给予的鼓励与支持，才使本书在如此短的时间里得以完成。

由于本人学识和水平所限，书中难免有错误和不妥之处，敬请读者批评指正。

编 者
2006 年 4 月于北京

目 录

第 1 章 化工数学模型 1

1.1 化工数学模型分类	1
1.1.1 按系统和数学性质分类	2
1.1.2 按建模方法分类	2
1.1.3 按量化程度分类	3
1.2 传递过程基本方程	3
1.2.1 连续性方程	3
1.2.2 动量衡算(运动)方程	5
1.2.3 能量传递方程	8
1.2.4 质量传递方程	11
1.2.5 传递方程的类比	12
1.3 反应动力学方程	13
1.3.1 均相反应动力学	13
1.3.2 气固催化动力学	14
1.4 化工数学建模方法	16
1.4.1 理论分析法	16
1.4.2 实验归纳法	21
习题	26
参考文献	27

第 2 章 微分方程概论 28

2.1 微分方程的分类	28
2.1.1 常微分方程	28
2.1.2 偏微分方程	29
2.2 微分方程定解条件	30
2.2.1 初始条件与初值问题	30
2.2.2 边界条件与边值问题	31
2.2.3 初边值问题	33
2.3 微分方程解析原理	34
2.3.1 常微分方程的通解和特解	34
2.3.2 微分算子和偏微分方程的解	34
2.3.3 叠加原理	35
习题	37
参考文献	38

第 3 章 场论初步 39

3.1 向量代数和向量分析	39
3.1.1 数量与向量	39

3.1.2 向量的运算	40
3.1.3 向量函数的微分	42
3.1.4 向量函数的积分	45
3.2 数量场	50
3.2.1 等值面	51
3.2.2 方向导数	51
3.2.3 梯度	52
3.2.4 梯度的运算性质	53
3.3 向量场	54
3.3.1 向量线	54
3.3.2 通量和散度	55
3.3.3 环量和旋度	58
3.3.4 场函数导数与梯度、散度和旋度 的关系	62
3.4 不同坐标系的梯度、散度和旋度	63
3.4.1 坐标变换	63
3.4.2 柱坐标系	64
3.4.3 球坐标系	66
3.5 化工中特殊向量场及应用	67
3.5.1 保守场	67
3.5.2 管形场	69
3.5.3 调和场	70
3.5.4 流体力学方程	71
习题	72
参考文献	73

第 4 章 复变函数 74

4.1 复数与复变函数	74
4.1.1 复数的概念及几何表示	74
4.1.2 复数的运算	76
4.1.3 复变函数	78
4.1.4 复变函数的极限和连续性	81
4.2 解析函数	83
4.2.1 复变函数的导数	83
4.2.2 解析函数的概念	84
4.2.3 初等函数	85
4.3 复变函数的积分	90
4.3.1 积分定义及性质	90
4.3.2 柯西定理	92

4.3.3 柯西积分公式	94
4.3.4 解析函数的高阶导数	96
4.4 复变级数	97
4.4.1 复数项级数	97
4.4.2 幂级数	98
4.4.3 泰勒级数	100
4.4.4 罗朗级数	102
4.5 留数理论及其应用	105
4.5.1 孤立奇点	105
4.5.2 留数及其计算	108
4.5.3 应用留数计算定积分	111
4.5.4 辐角原理及其应用	114
习题	116
参考文献	118
第5章 积分变换	119
5.1 傅里叶变换	119
5.1.1 傅里叶积分	119
5.1.2 傅里叶变换	122
5.1.3 傅里叶变换的基本性质	128
5.1.4 卷积与相关函数	130
5.2 离散与快速傅里叶变换	132
5.2.1 离散傅里叶变换	132
5.2.2 离散傅里叶变换的性质	134
5.2.3 快速傅里叶变换算法	135
5.3 拉普拉斯变换	136
5.3.1 拉普拉斯变换的定义	136
5.3.2 拉普拉斯变换的性质	139
5.3.3 初值和终值定理	142
5.4 拉普拉斯逆变换	143
5.4.1 拉普拉斯逆变换的定义	143
5.4.2 逆变换的求法	144
5.4.3 卷积定理	146
5.5 积分变换的应用	148
5.5.1 微分方程的傅氏变换解法	148
5.5.2 微分方程的拉氏变换解法	149
5.5.3 线性系统中的应用	150
习题	152
参考文献	154
第6章 常微分方程	155
6.1 一阶微分方程	155
6.1.1 分离变量法	155
6.1.2 非齐次常数变易法	158
6.1.3 恰当方程与积分因子	161
6.1.4 隐导数微分方程参数解法	164
6.2 高阶微分方程	167
6.2.1 可积方程	167

6.2.2 可降阶方程	170
6.2.3 常系数线性方程	172
6.2.4 变系数线性方程	177
6.3 解析逼近解法	181
6.3.1 简单幂级数解法	181
6.3.2 勒让德方程解法	182
6.3.3 贝赛尔方程解法	183
6.3.4 小参数解法	184
6.4 初边值定解问题	185
6.4.1 拉氏变换解初值问题	185
6.4.2 化边值问题为初值问题	186
6.4.3 常微分方程边值问题	188
6.4.4 拉氏变换解边值问题	189
习题	192
参考文献	193
第7章 常微分方程组	194
7.1 常系数齐次微分方程组	195
7.1.1 A矩阵有单值实数特征根	195
7.1.2 A矩阵有单值复数特征根	196
7.1.3 A矩阵有多重特征根	198
7.1.4 二阶微分方程组	200
7.2 常系数非齐次微分方程组	201
7.2.1 向量变易法	201
7.2.2 线性变换法	202
7.2.3 待定系数法	203
7.3 非线性微分方程组	204
7.3.1 消元法	204
7.3.2 首次积分法	206
7.3.3 Hesse 代换法	208
7.4 常微分方程组初边值问题	210
7.4.1 初值问题	210
7.4.2 边值问题	216
7.4.3 非齐次边初值问题转换	219
7.4.4 双膜传质模型	222
习题	224
参考文献	226
第8章 偏微分方程 I	227
8.1 微偏分方程的基本理论	227
8.1.1 偏微分方程的概念	227
8.1.2 叠加原理	229
8.1.3 齐次化原理	231
8.1.4 定解问题的适定性	232
8.2 一阶偏微分方程初等解法	234
8.2.1 通解积分	234
8.2.2 定解问题	235
8.3 特征线法	238

8.3.1 一阶线性偏微分方程	238	9.3.4 Bessel 函数的应用	310
8.3.2 一阶拟线性方程	241	9.4 勒让德函数法	313
8.3.3 一维波动方程的初值问题	244	9.4.1 Legendre 函数的定义	313
8.4 格林函数法	247	9.4.2 Legendre 函数的性质	318
8.4.1 线性偏微分方程的基本解	247	9.4.3 Legendre 函数的应用	320
8.4.2 波动方程初值问题	248	习题	321
8.4.3 热传导方程初值问题	249	参考文献	323
8.4.4 传质扩散方程初值问题	250		
8.5 相似分析法	251	第 10 章 偏微分方程组	325
8.5.1 热传导方程定解问题	251	10.1 非稳态双膜相际传质过程	325
8.5.2 点源强爆炸问题	252	10.1.1 相际传质数学模型	325
8.6 变分原理与变分法	254	10.1.2 数学模型求解	326
8.6.1 古典变分问题	254	10.1.3 相际传质过程分析	329
8.6.2 泛函变分原理	256	10.2 伴随化学反应的相际传质过程	330
8.6.3 欧拉方程解析法	257	10.2.1 数学模型	330
8.6.4 变分问题直接法	264	10.2.2 模型求解	331
习题	268	10.2.3 传质速率分析	335
参考文献	270	10.3 填充塔 RTD 模型	336
第 9 章 偏微分方程 II	271	10.3.1 数学模型	336
9.1 分离变量法	271	10.3.2 模型求解	338
9.1.1 热传导定解问题	271	10.3.3 计算模拟	339
9.1.2 波动方程定解问题	277	10.4 循环反应器 RTD 模型	341
9.1.3 Sturm-Liouville 问题	280	10.4.1 数学模型	341
9.1.4 非齐次边界条件的处理	282	10.4.2 模型求解	342
9.1.5 高维及高阶方程的定解问题	286	10.4.3 计算模拟	344
9.2 积分变换法	288	习题	345
9.2.1 热传导问题	289	参考文献	345
9.2.2 停留时间分布问题	292		
9.2.3 相际传质问题	296	附录 A 傅里叶积分变换表	346
9.3 贝赛尔函数法	300	附录 B 拉普拉斯积分变换表	349
9.3.1 Bessel 函数的定义	300	附录 C 三角函数和双曲函数公式	351
9.3.2 Bessel 函数的性质	304	附录 D 误差函数	352
9.3.3 函数的 Bessel 级数展开	306	附录 E 参数估值程序框图	353
		附录 F 习题参考答案	355

第1章 化工数学模型

化工是化学工业和化学工程的简称，因此，化工既可理解成一个行业，又可理解成一种学科。化工无论作为一个行业还是作为一种学科，在过去的一个世纪里得到了突飞猛进的发展。在这期间，数学和计算机技术在化工发展过程中起到了巨大的推动作用。可以说，没有数学就不会有今天的化学工业。

化学工业在发展初期，化学工程仅属于一种技艺，相关工艺和过程的开发主要依靠经验，凭借逐级试验放大开发工业化技术。直到 20 世纪中叶，化学工程才作为一门科学得到快速发展，尤其是自 1946 年第一台计算机问世以来，计算机技术的发展和计算能力的提高为化工技术的快速发展提供了条件和可能。计算机在化工领域的广泛应用，使化工技术逐渐从定性走向定量，化工过程开发由逐级放大走向模型放大。20 世纪 90 年代，化工过程计算机辅助设计软件的开发和应用快速发展，像 ASPEN Plus、PRO II 等优秀化工流程模拟软件已趋于成熟和实用化，并在很多大型石油化工企业、化工设计部门投入使用。化工数学模拟和计算机技术的普遍应用，大大加快了化工过程新工艺、新技术的开发进程，促进了化工领域的技术进步，使化学工业得以快速稳步的发展。

数学是人们认识事物的重要工具，而数学模型则是将数学和实际事物联系起来的纽带。数学模型“源于现实，高于现实”，是对实际问题经过抽象和简化，反映实际问题某种特征本质的一种数学结构。这里所谓的数学结构可以是一种数学关系式（如代数方程、微分方程、经验关联式等），也可以是一种数据图表或数学语言描述。

如果所建立的数学模型是正确的，那么对源于实际系统的数学模型进行研究就等同于对实际系统的研究。例如，改变数学模型中的某些参数进行模型求解得到目标变量的变化规律，则相当于在实际系统中变化相关参数进行真实的试验。这种基于数学模型的计算研究和分析称作数学模拟或计算机模拟。数学模拟有常规实验不可比拟的优点，如易于实现、容易操作、速度快、成本低、可做灵敏度分析等。因而受到广泛重视，并在化工过程开发、过程优化和控制等方面得到越来越普遍的应用。

1.1 化工数学模型分类

在化工应用中，通常将数学模型限定为描述所研究对象或系统在某些方面的内在规律的数学表达式，如代数方程（组）、微分方程（组）、微积分方程等。化工数学模型种类繁多，形式多样，有必要对其进行合理分类。一般情况下，可将化工数学模型按其数学性质、建模方法或定量化程度进行分类。

1.1.1 按系统和数学性质分类

(1) 确定性数学模型和随机性数学模型

确定性模型是指数学模型中的自变量与因变量之间存在确定的对应关系，大多数化工数学模型属于确定性模型。对于绝大多数描述反应和分离过程的数学模型来讲，其输入和输出变量之间均存在定量的对应关系，即使过程出现多态现象，也能采用合适的数学方法进行描述，仍应属于确定性问题。因此，确定性数学模型在化工领域是研究的重点。

随机性模型中的自变量与因变量之间不存在确定的对应关系，例如给随机性系统一个确定的输入，其输出将不是一个确定的量值，而只存在一个概率分布密度。对这样的系统，可以利用统计学的方法进行描述。反应工程中 RTD 示踪实验即是一个典型的随机性数学模型的应用示例，在反应器入口加入示踪，在反应器出口检测的响应仅是一个概率分布，但这种概率分布规律对反应器的设计和优化操作具有重要的指导意义。随机性模型在化工多相流计算模拟、分子模拟、反应过程的 Monte Carlo 模拟中也有着广泛的应用。

(2) 线性模型和非线性模型

如果构成数学模型的原始数学表达式呈线性关系，满足线性函数的均匀性和叠加性，则此类数学模型被称为线性模型。线性模型所描述的系统称为线性系统。线性代数方程、线性常微分方程和偏微分方程均属于线性数学模型的范畴。线性问题的自变量和因变量之间的逻辑关系比较简单，容易解析求解和分析。

当数学模型中含有非线性项或构成模型的函数关系不满足线性函数的均匀性和叠加性，此类数学模型即为非线性模型。一般情况下，非线性模型难以解析求解，通常只能依靠数值方法进行模拟求解。化工中遇到的数学问题一般都比较复杂，大多数属于非线性问题。

(3) 集中参数模型和分布参数模型

集中参数模型是指模型因变量不随空间坐标变化的一类数学模型，如理想混合反应器模型和无梯度微分反应器模型，反应过程参数在反应器内是均一的，不随空间位置变化，其目标参数只是反应过程空速（或空时）的函数。与集中参数模型相反，分布参数模型中的因变量不仅与时间变量有关，而且还与空间位置坐标有关，如时变传热模型、流动反应器模型等。集中参数模型一般由代数方程或常微分方程构成，而分布参数模型通常由偏微分方程构成。

(4) 静态模型和动态模型

根据系统模型随时间的变化行为分为静态模型和动态模型。静态模型又称稳态模型，该类模型中的诸参量不随时间变化，并不包含时间变量。静态模型通常对应于化工过程中稳定的连续操作过程和对静态事物的描述。动态模型也称非稳态模型，它考察系统过程随时间的动态变化规律。在化工领域，描述间歇操作过程和动态传递过程的数学模型均属于非稳态模型。

(5) 定常数学模型和时变数学模型

系统模型中的全部参数与时间无关，即所有参数为常数时此类模型称为定常数学模型。对于定常数学模型，在初始条件给定的情况下，系统输出的形状仅取决于输入的形状，而与输入的时刻无关。相反，若模型中某些模型参数是时间的函数，则该类模型称为时变数学模型。

定常数学模型用常系数（微分或差分）方程表示，而时变数学模型用变系数（微分或差分）方程表示。

1.1.2 按建模方法分类

根据数学建模方法不同，可将数学模型分为机理模型、经验模型和半经验模型。

根据物理和化学原理推导得出的数学模型称为机理模型。机理模型一般不包含待定参数，能够反映研究系统的实质和内在规律，适用范围宽。但是，机理模型的建模过程有赖于建模者对研究系统实质和内在规律的深刻认识，对物理模型认识、抽象和分析的任何局限都会直接影响所建模型的正确性和准确性。化工过程涉及的理想气体状态方程、过程衡算方程等均属于机理模型。在条件许可的情况下，应尽可能建立机理模型。

经验模型则是指根据实验观测数据而归纳得到的自变量与因变量之间的关联模型。因为经验模型仅是实验数据的关联，其关联函数形式在很大程度上可以随意选择，在化工中也有着广泛的应用。值得注意的是，经验模型只在实验区间内适用，将其外延是有风险的。另外，经验模型中的经验常数不可能有物理意义，经验模型本身也只能有实用价值，而不可能有理论意义。

具有一定物理意义的经验模型或含有经验常数的机理模型称为半经验模型，有时又称作半机理模型或混合模型。化工系统中，这一类模型也占有一定比重，例如传递过程模型、基于机理得到的反应动力学模型等。

1.1.3 按量化程度分类

根据数学模型的量化程度，又可将数学模型分为数值模型、数量级模型、定性模型和布尔模型四种。

数值模型的参量之间具有严格的定量关系，这类模型在化工中用途很广。数量级模型对量化的要求要低，其关注的是某些参量数值处于哪些数量级，而并不关心这些参数的精确数值。对于定性模型来讲，模型注重的是变量之间的定性关系，也即模型描述的是变量变化的方向，而不是具体量值。定性模型用于过程识别和过程控制是很有价值的。布尔模型只描述系统的“是-否”这种简单的逻辑关系。布尔模型在化工中也经常用到，如描述大系统的关联矩阵、采用“场”、“流”的概念分析化工过程等。

化工领域绝大多数的数学建模和模拟工作是属于数值问题，然而随着人工智能的出现，化工界已开始重视定性方法的重要性，将来在数量级模型和定性模型的应用方面也会得以推广。

1.2 传递过程基本方程

化工传递过程包括动量传递、能量传递和质量传递，是构成化学工程科学的重要基础。在化工领域，很多过程和设备数学模型是建立在传递过程基本方程基础之上的。建立传递过程方程的基础是平衡原理和相关过程定理。在应用过程中，如果每次都要对传递过程进行分析建模将是非常麻烦费事的，而如果能熟练掌握传递过程的普适基本方程，在应用时加以适当简化和改造将会事半功倍。

1.2.1 连续性方程

化工传递过程所研究的体系一般都遵循质量守恒定律。并且，质量守恒定律不仅适用于单组分流体，而且也适用于多组分流体。

在直角坐标系中取如图 1-1 所示的无限小微元体，微元体体积为 $dx dy dz$ ，假定流体的质量流率在某一方向存在微小变化 $(\partial \rho u_x / \partial x) dx$ ，而在三维空间上应满足质量守恒定律，即

$$[\text{累计质量流率}] + [\text{输出质量流率}] - [\text{输入质量流率}] = 0$$

将图 1-1 中所列出的相应质量流率代入质量守恒关系式，即可得到无源或无汇条件下的连续性方程

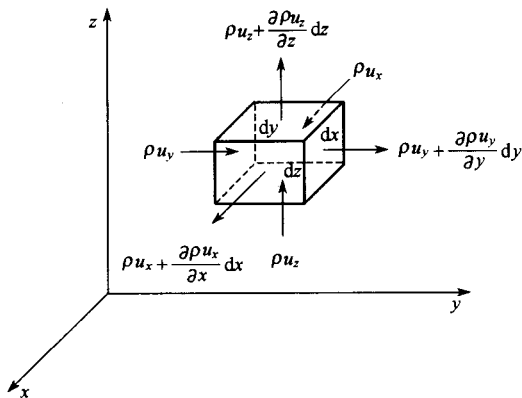


图 1-1 流体微元体示意图

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho u_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho u_z}{\partial z} = 0 \quad (1.2-1)$$

如写成向量形式, 则有

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1.2-2)$$

当流体为不可压缩流体时, 也即介质密度 ρ 为常数时, 连续性方程变为更简单的形式

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.2-3)$$

将式(1.2-1)展开, 可以得到连续性方程的另一种表达形式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_x \frac{\partial \rho}{\partial x} + u_y \frac{\partial \rho}{\partial y} + u_z \frac{\partial \rho}{\partial z} + \rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = 0 \quad (1.2-4)$$

式中前 4 项正好是密度的随体导数 (也称质点导数)。

$$\frac{D\rho}{Dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \right) \rho \quad (1.2-5)$$

因此, 采用向量形式表示为

$$\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} + \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.2-6)$$

式(1.2-6)中各项的物理意义明确, 第一项表示流体微团的相对密度变化率, 第二项表示流体微团的相对体积变化率。为了维持流体微团的质量守恒, 流体微团的相对密度变化率必须等于负的相对体积变化率。

对于多组分流体体系, 需对体系的每一组分分别建立连续性方程。由于多组分体系存在的质量分数梯度会引起分子扩散通量 j , 因此多组分体系的质量通量是由对流通量和分子扩散通量两部分组成的。对于多组分体系往往还存在化学反应, 因而在建立连续性方程时还需考虑源项。多组分连续性方程的一般形式为

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (j_i + \rho_i \mathbf{u}) = r_i \quad (1.2-7)$$

式中的分子扩散通量由 Fick 定律确定, 如 x 方向的扩散通量为

$$j_i = -D_{ik} \rho \frac{\partial w_i}{\partial x} \quad (1.2-8)$$

在解决具体问题时, 适当选择坐标系是很重要的, 它往往可使控制方程得到降维, 并可简化问题的边界条件, 从而可以很大程度地方便问题的求解。对连续性方程进行坐标变换就可得到在柱坐标系和球坐标系中的表达式。

连续性方程在柱坐标系中的一般表达式为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho u_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho u_\theta) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_z) = 0 \quad (1.2-9)$$

连续性方程在球坐标系中的一般表达式为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 \rho u_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho u_\theta \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}(\rho u_\phi) = 0 \quad (1.2-10)$$

1.2.2 动量衡算（运动）方程

化工研究和处理的对象大多数属于流体，对流体流动规律的认识非常重要。流体的运动方程是构成化工数学模型的重要基础方程之一，是化工“三传”过程的基础。流体运动方程是在牛顿力学的基础上建立的。按照牛顿力学第二定律，流动流体的动量随时间的变化率应等于作用在该流体上的诸外力之合力。在直角坐标系中，采用欧拉法可将流体运动方程写成

$$M \frac{Du}{Dt} = F \quad (1.2-11)$$

式中，速度 u 的随体导数正好是流体质点的加速度， F 为流体所受外力的合力，一般可将外力分为质量力 F_b 和表面力 F_s 。

(1) 质量力和表面力

作用在流体上的质量力属于非接触力，只与流体本身的物质存在有关，而与流体的接触环境无关。例如重力、超重力、静电力等均属于质量力的范畴。为了方便，我们在建模过程中质量力只考虑重力的存在并用符号 G 表示。在直角坐标系中，对于 $dV = dx dy dz$ 这样的微元体，流体所受质量力在 x 、 y 、 z 三个坐标方向上的分量分别为

$$\begin{cases} dF_{bx} = \rho G_x dx dy dz \\ dF_{by} = \rho G_y dx dy dz \\ dF_{bz} = \rho G_z dx dy dz \end{cases} \quad (1.2-12)$$

如果 x 和 y 轴取水平方向， $G_x = G_y = 0$ ，只有 z 方向的分量不为零，且 $G_z = -g$ 。

表面力是指流体微元表面所受到的作用力，是由流体微元体与外部流体相互作用而产生的。流体之间的相互作用力包括静压力和黏性力两种。在黏性流体中，表面力并不与作用表面的法线方向一致，因此需将表面力分解成一个垂直于作用面的法向应力和两个平行于作用面的切向应力，并分别简称为正应力和切应力。为了方便，通常将静压力和正应力归并到一起进行分析。

表面力作用在 $dx dy dz$ 六面体微元上，微元体的每个表面上将存在三个力的分量，即一个正应力 τ_{ii} 和两个切应力 τ_{ij} 和 τ_{ik} 。为了方便，约定应力的下标中第一个字母表示应力分量作用面的法向，第二个字母表示应力本身的作用方向。

图 1-2 是对六面体微元表面力的分析示意，其中 (a) 给出的是背向三个表面的受力情况，(b) 给出的是正向三个表面的受力情况。由图可以看到，作用于流体微元的表面力包括三个正应力和六个切应力。利用力学中的动量矩定理对黏性流体微元受到的切应力进行分析，可以得出对偶切应力应该相等，即

$$\begin{cases} \tau_{xy} = \tau_{yx} \\ \tau_{yz} = \tau_{zy} \\ \tau_{zx} = \tau_{xz} \end{cases} \quad (1.2-13)$$

因此，流体微元所受到的表面力可以用三个正应力和三个切应力来表述。

根据图 1-2 中对流体微元表面力的微分分析，可以归纳整理得到作用在流体微元三个坐标方向上的表面力分别为

$$\begin{cases} dF_{sx} = \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) dx dy dz \\ dF_{sy} = \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right) dx dy dz \\ dF_{sz} = \left(\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) dx dy dz \end{cases} \quad (1.2-14)$$

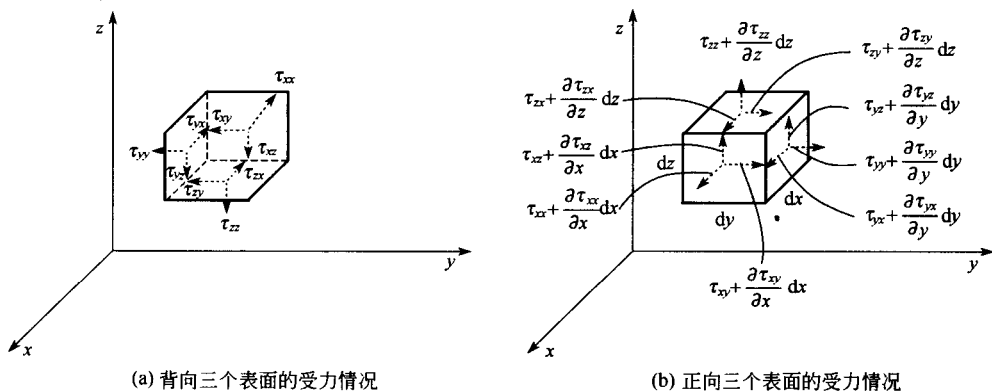


图 1-2 流体微元表面力分析示意图

(2) 应力表示的运动方程

将式(1.2-12)和式(1.2-14)代入式(1.2-11), 经化简整理可得用应力表示的流体微分运动方程

$$\begin{cases} \rho \frac{Du_x}{Dt} = \rho G_x + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \\ \rho \frac{Du_y}{Dt} = \rho G_y + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \\ \rho \frac{Du_z}{Dt} = \rho G_z + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \end{cases} \quad (1.2-15)$$

在上述三个运动方程中, 除了三个质量力 G 一般为已知量外, 其余变量均为未知量。方程中未知量包括密度、三个速度向量、三个正应力和三个切应力共有 10 个之多, 因而用应力表示的运动方程是不封闭的。如要确定以上方程中变量之间的定量关系, 必须寻求其它补充关系。

(3) 流体运动本构关系

流体运动中应力与形变速率的关系称为本构关系。对于一维黏性流体, 应力与剪切速率之间符合著名的牛顿黏性公式

$$\tau = \mu \frac{du_x}{dy} \quad (1.2-16)$$

对于三维流体流动, 每一个切应力与相邻两个方向上的形变速率有关, 可以推导得出三个切应力的本构关系

$$\begin{cases} \tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) \\ \tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) \\ \tau_{zx} = \tau_{xz} = \mu \left(\frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) \end{cases} \quad (1.2-17)$$

作用在流体微元表面上的正应力是由两部分组成的, 其中一部分产生于流体静压力的作用, 另一部分则为流体流动产生的剪切力的分量。将两者结合, 即可导出正应力与压力和形变速率之间的关系

$$\begin{cases} \tau_{xx} = -p + 2\mu\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}\right) - \frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \\ \tau_{yy} = -p + 2\mu\left(\frac{\partial u_y}{\partial y}\right) - \frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \\ \tau_{zz} = -p + 2\mu\left(\frac{\partial u_z}{\partial z}\right) - \frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \end{cases} \quad (1.2-18)$$

在上式推导中忽略了流体的体膨胀黏性系数, 一般情况下体膨胀黏性系数与压力和剪切黏性系数相比是小量, 只有在处理像激波层这样的极端问题时才需加以考虑。

(4) Navier-Stokes 方程

将上面推导出的切应力与正应力的表达式代入式(1.2-15)中应力表示的运动方程, 经整理即可得到完整的流体运动微分方程式

$$\begin{cases} \rho \frac{Du_x}{Dt} = \rho G_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{3}\mu \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \\ \rho \frac{Du_y}{Dt} = \rho G_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{3}\mu \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \\ \rho \frac{Du_z}{Dt} = \rho G_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{3}\mu \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \end{cases} \quad (1.2-19)$$

将式(1.2-19)写成向量形式, 则有

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \rho \mathbf{G} - \nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{3}\mu \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (1.2-20)$$

对于不可压缩的牛顿流体, 流场应满足连续性方程 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, 因而上式的最后一项等于零, 即

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \rho \mathbf{G} - \nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (1.2-21)$$

式(1.2-21)是由 Navier 和 Stokes 分别各自独立推导得到的, 因而被称为 Navier-Stokes 方程。Navier-Stokes 方程描述了流体在流场中随时间和空间位置的运动规律, 在流体力学和化工过程模拟中有着广泛的应用。

有时根据具体问题, 使用柱坐标系或球坐标系会更方便些, 这时方程中的一些项会变为零而被消去, 从而使方程得到简化。Navier-Stokes 方程在柱坐标系中的展开形式为

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta^2}{r} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = \rho G_r - \frac{\partial p}{\partial r} + \\ \quad \mu \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru_r) \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} \right\} \\ \rho \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r u_\theta}{r} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) = \rho G_\theta - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \\ \quad \mu \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru_\theta) \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2} \right\} \\ \rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = \rho G_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \\ \quad \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right] \end{cases} \quad (1.2-22)$$

Navier-Stokes 方程在球坐标系中的展开形式为

$$\left\{ \begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + \frac{u_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial u_r}{\partial \phi} - \frac{u_\theta^2 + u_\phi^2}{r} \right) &= \rho G_r - \frac{\partial p}{\partial r} \\ &+ \mu \left(\nabla^2 u_r - \frac{2}{r^2} u_r - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} - \frac{2}{r^2} u_\theta \cot \theta - \frac{2}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial u_\phi}{\partial \phi} \right) \\ \rho \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial u_\theta}{\partial \phi} + \frac{u_r u_\theta}{r} - \frac{u_\phi^2 \cot \theta}{r} \right) &= \rho G_\theta - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} \\ &+ \mu \left(\nabla^2 u_\theta + \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta}{r^2 \sin^2 \theta} - \frac{2 \cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial u_\phi}{\partial \phi} \right) \\ \rho \left(\frac{\partial u_\phi}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\phi}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\phi}{\partial \theta} + \frac{u_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial u_\phi}{\partial \phi} + \frac{u_\phi u_r}{r} + \frac{u_\theta u_\phi \cot \theta}{r} \right) &= \rho G_\phi - \\ &\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial p}{\partial \phi} + \mu \left(\nabla^2 u_\phi - \frac{u_\phi}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{2}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial u_\theta}{\partial \phi} + \frac{2 \cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial u_\theta}{\partial \phi} \right) \end{aligned} \right. \quad (1.2-23)$$

1.2.3 能量传递方程

在化工过程研究和开发中,对体系进行能量衡算是经常遇到的问题。根据热力学第一定律推导得出的微分能量方程具有一定普适性,在反应和分离过程的研究开发中有着广泛的应用。下面应用欧拉方法从能量守恒定律出发来推导能量传递方程。

对于任何选定的控制体微元来说,单位时间内微元内流体总能量的增加应等于流过控制面流体的净流入能量和传给微元内流体的热量以及作用在微元流体上的外力所做功之和,即

$$\boxed{\begin{array}{c} \text{微元流体} \\ \text{的总能量} \\ \text{累积速率} \end{array}} = \boxed{\begin{array}{c} \text{净流入微} \\ \text{元的能量} \\ \text{速率} \end{array}} + \boxed{\begin{array}{c} \text{传给微} \\ \text{元的热量} \\ \text{量速率} \end{array}} + \boxed{\begin{array}{c} \text{外力对微} \\ \text{元流体的} \\ \text{做功速率} \end{array}} \quad (1.2-24)$$

选定如图 1-1 中所示的微元六面体作为控制体,在直角坐标系中确定上式中各项的表达式,综合归纳后即可得到能量方程。

(1) 净流入微元的能量速率

将单位质量流体的总能量 E 分成内能 U 和动能 K 两部分进行分析,其中动能为速度平方的二分之一,即 $K = u^2/2$ 。在 x 方向流入和流出控制面 $dydz$ 的能量速率差应为

$$\rho u_x E dydz - \left(\rho u_x E + \frac{\partial \rho u_x E}{\partial x} dx \right) dydz = - \frac{\partial \rho u_x E}{\partial x} dx dydz \quad (1.2-25)$$

在 y 和 z 方向上,同样得到类似的结果,将三个方向的能量增加和即得到净流入微元控制体的总能量增加速率

$$- \left[\frac{\partial \rho u_x E}{\partial x} + \frac{\partial \rho u_y E}{\partial y} + \frac{\partial \rho u_z E}{\partial z} \right] dx dydz \quad (1.2-26)$$

(2) 传给微元流体的热量速率

流体微元受热存在传热和热源加热两种形式,传热包括与周围流体或环境的导热及热辐射两种形式。一般情况下,流体之间通过辐射传递的热量与导热和加热热源相比可以忽略,因此在这里仅考虑存在导热和热源的情况。根据傅里叶定律,单位时间内通过单位面积的在 x 、 y 、 z 三个方向上的导热分量为

$$q_x = -k \frac{\partial T}{\partial x}, \quad q_y = -k \frac{\partial T}{\partial y}, \quad q_z = -k \frac{\partial T}{\partial z} \quad (1.2-27)$$

式中, k 是热导率,单位为 $W/(m \cdot K)$ 。

考虑导热速率在 x 、 y 、 z 三个方向上均存在一定微分增量, 分别对 x 、 y 、 z 三个方向的导热速率进行衡算, 即可得到通过导热传给微元流体的热量速率

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right] dx dy dz \quad (1.2-28)$$

如果流体微元内存在化学反应或其它产生热效应的现象, 即可视为微元控制体存在内热源。定义单位时间和单位体积内热源生成的热量为热源发热率, 用 $\dot{q}$ 表示, 单位为 $\text{J}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ 。由此可知, 内热源传给微元流体的热量速率为

$$\dot{q} dx dy dz \quad (1.2-29)$$

(3) 外力对微元流体的做功速率

正如推导流体运动方程所指出的, 作用于流体微元的外力包括质量力和表面力两种。前者对流体微元的做功速率为

$$\rho(\mathbf{G} \cdot \mathbf{u}) dx dy dz = \rho(u_x G_x + u_y G_y + u_z G_z) dx dy dz \quad (1.2-30)$$

而对于表面力做功的情况略微复杂一些, 必须对三个方向的六个控制面进行分析。首先分析与 x 轴垂直的一对控制面。在上游控制面上, 作用于流体微元上表面力做功的功率为

$$-(u_x \tau_{xx} + u_y \tau_{xy} + u_z \tau_{xz}) dy dz$$

式中负号表示应力方向与速度方向相反。而在下游控制面上, 表面力做功的功率为

$$\left[\left(u_x + \frac{\partial u_x}{\partial x} dx \right) \left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx \right) + \left(u_y + \frac{\partial u_y}{\partial x} dx \right) \left(\tau_{xy} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} dx \right) + \left(u_z + \frac{\partial u_z}{\partial x} dx \right) \left(\tau_{xz} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} dx \right) \right] dy dz$$

略去上式中的高阶小量, 整理后减去上游控制面上的做功功率, 即得到作用于流体微元一对控制面上的表面力所做功的净功率为

$$\frac{\partial}{\partial x} (u_x \tau_{xx} + u_y \tau_{xy} + u_z \tau_{xz}) dx dy dz$$

同理可得分别作用在与 y 轴和 z 轴垂直的两对控制面上的表面力所做功的功率, 将全部表面力的做功功率加和在一起, 可得到表面力对整个微元流体的做功速率

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} (u_x \tau_{xx} + u_y \tau_{xy} + u_z \tau_{xz}) + \frac{\partial}{\partial y} (u_x \tau_{yx} + u_y \tau_{yy} + u_z \tau_{yz}) + \frac{\partial}{\partial z} (u_x \tau_{zx} + u_y \tau_{zy} + u_z \tau_{zz}) \right] dx dy dz \quad (1.2-31)$$

(4) 微分能量方程

将推导得到的各项能量变化速率表达式(1.2-26)、式(1.2-28)、式(1.2-29)和式(1.2-31)代入衡算方程(1.2-24)可得

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) = & -\frac{\partial}{\partial x} (\rho u_x E) - \frac{\partial}{\partial y} (\rho u_y E) - \frac{\partial}{\partial z} (\rho u_z E) + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{q} + \rho(u_x G_x + u_y G_y + u_z G_z) + \left[\frac{\partial}{\partial x} (u_x \tau_{xx} + u_y \tau_{xy} + u_z \tau_{xz}) \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial y} (u_x \tau_{yx} + u_y \tau_{yy} + u_z \tau_{yz}) + \frac{\partial}{\partial z} (u_x \tau_{zx} + u_y \tau_{zy} + u_z \tau_{zz}) \right] \end{aligned} \quad (1.2-32)$$

为了进一步简化式(1.2-32), 结合连续性方程(1.2-1), 先将总能量的积累速率与能量的流入速率合并用总能量的随体导数表示, 即

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u_x E) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho u_y E) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u_z E) = \rho \frac{DE}{Dt} \quad (1.2-33)$$

然后以 u_x 、 u_y 、 u_z 分别与式(1.2-15)中的三式相乘, 之后将三式相加。考虑存在

$$\frac{DK}{Dt} = \frac{D}{Dt} \left(\frac{u^2}{2} \right) = u_x \frac{Du_x}{Dt} + u_y \frac{Du_y}{Dt} + u_z \frac{Du_z}{Dt} \quad (1.2-34)$$

以上三式之和为