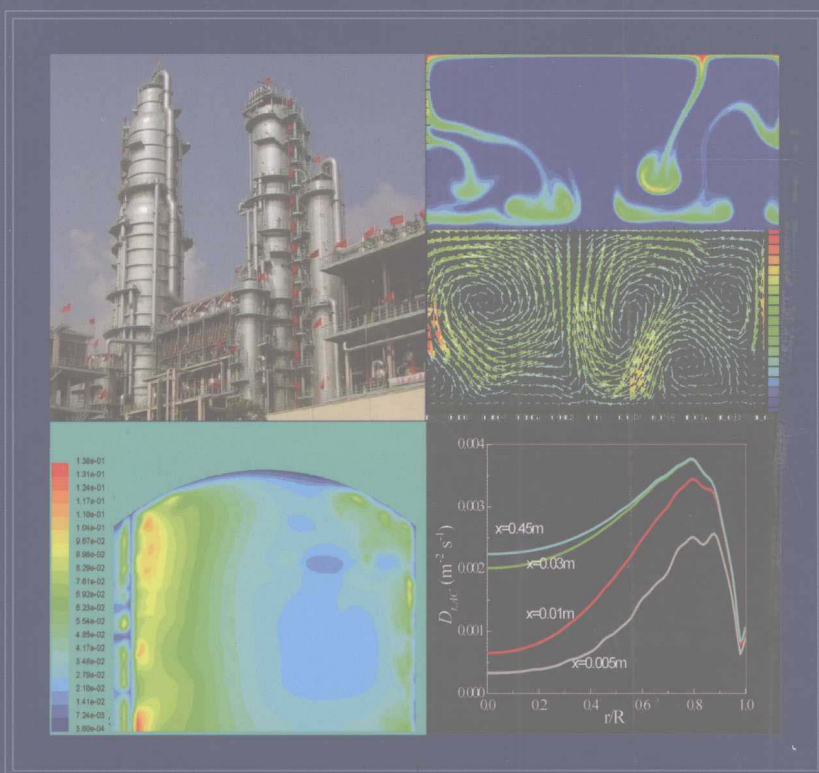


# 化工计算传质学导论

余国琮 袁希钢



# 化工计算传质学导论

余国琮 袁希钢



## 内容提要

本书针对化工气液传质过程,系统介绍计算传质学体系的基本微分方程组数学模型,并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;书中同时介绍计算模型在模拟精馏、吸收、吸附和催化反应等化工过程中的应用、多组分传质计算模型以及 Marangoni 及 Rayleigh 传质界面效应的模拟计算方法。本书可作为化工专业研究生教学参考书,也可为有关科技人员提供参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

化工计算传质学导论 /余国琮,袁希钢. —天津:天津大学出版社,2011.12(2011.12重印)

ISBN 978-7-5618-3771-9

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(2011)第207812号

出版发行 天津大学出版社

出版人 杨欢

地址 天津市卫津路92号天津大学内(邮编:300072)

电话 发行部:022—27403647 邮购部:022—27402742

网址 [publish.tju.edu.cn](http://publish.tju.edu.cn)

印刷 北京华联印刷有限公司

经销 全国各地新华书店

开本 185mm×260mm

印张 25

字数 625千

版次 2011年12月第1版

印次 2011年12月第2次

定价 65.00元(平装)

# 序

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、基础学科以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，例如计算力学、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学 (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，例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 Schmidt 准数( $Sc_t$ )或湍流 Peclet 准数( $Pe_t$ )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而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(例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、结构影响、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与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且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、介观、宏观以及大宏观尺度)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及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。其中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。

本书只涉及化工中气液传质过程的计算传质学,其中第3~8章为过程传质计算,第9、10章为界面传质计算。书中第1、2章简要介绍计算流体力学及计算传热学作为相关学科的基本知识,第3章介绍计算传质学的基本方程,第4章为数值模拟计算示例,第5、6、7、8章为过程传质计算在化工过程中的应用以及多组分传质的计算,第9、10章为界面传质计算的一些内容,包括界面效应对传质过程的影响。

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。书中除第1、2章及第8、10章的部分内容为介绍必要的预备知识外,其余内容均取自我们近年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《化工计算传质学导论》

的教材；另一目的是为今后研究生及有关人员进一步开展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联合国家重点实验室进行，并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工学院、化学工程研究所的支持以及刘伯潭副教授和付博、陈淑勇等研究生们对编辑工作的协助，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

袁希钢

天津大学教授

天津大学教授

中国科学院院士

# 目 录

序	i
引言	1
<b>第 1 章 相关学科领域(一): 计算流体力学基础</b>	<b>5</b>
1.1 动量守恒方程及其封闭	5
1.2 湍流涡黏模型	7
1.2.1 零方程模型	8
1.2.2 一方程模型	9
1.2.3 $k-\varepsilon$ 两方程模型	10
1.3 近壁区处理方法	16
1.3.1 壁面函数法	16
1.3.2 近壁模型法	19
1.4 雷诺应力湍流模型	19
1.4.1 雷诺应力方程模型	19
1.4.2 雷诺代数应力模型	20
1.5 湍流大涡模型	21
1.6 计算流体力学的计算方法	21
符号说明	22
参考文献	22
<b>第 2 章 相关学科领域(二): 计算传热学基础</b>	<b>23</b>
2.1 能量守恒方程及其封闭	23
2.2 湍流热扩散模型	25
2.2.1 零方程模型	25
2.2.2 一方程模型	25
2.2.3 $\overline{T'^2}-\varepsilon_T$ 两方程模型	26
2.3 近壁区处理方法	29
2.4 雷诺热流模型	30
2.5 雷诺热流代数模型	31
符号说明	31
参考文献	32

<b>第 3 章 计算传质学基本方程</b>	<b>33</b>
3.1 组分质量守恒方程及其封闭	35
3.2 湍流传质扩散模型	36
3.2.1 零方程模型	36
3.2.2 一方程模型	37
3.2.3 $\overline{c'^2} - \varepsilon_c$ 两方程模型	40
3.3 雷诺质流 $\overline{u'_i c'}$ 模型	49
3.3.1 标准雷诺质流模型	49
3.3.2 混合雷诺质流模型	51
3.3.3 代数雷诺质流模型	51
3.4 计算传质学的数学方程体系	52
3.4.1 数学模型方程组	52
3.4.2 数学模型方程体系的统一	55
3.5 湍流传递扩散系数的关系	57
3.6 边界条件的确定	58
符号说明	60
参考文献	61
<b>第 4 章 数值模拟示例——化工塔式传质设备内速度场的模拟</b>	<b>63</b>
4.1 模拟方程	64
4.2 板式塔模型	68
4.2.1 二维拟液相流模型	68
4.2.2 三维拟液相流模型	71
4.2.3 气液两相流模型	76
4.2.4 气液混合流模型	80
4.3 填料塔模型	82
4.3.1 体积平均法模型	84
4.3.2 单元综合法模型	92
符号说明	97
参考文献	99
<b>第 5 章 计算传质学的应用( I )——精馏过程</b>	<b>102</b>
5.1 板式塔的模拟	103
5.1.1 传质扩散模型(一)零方程模型	103
5.1.2 传质扩散模型(二) $\overline{c'^2} - \varepsilon_c$ 两方程模型	107
5.1.3 雷诺质流 $\overline{u'_i c'}$ 模型	131
5.2 填料塔的模拟	135
5.2.1 湍流传质扩散 $\overline{c'^2} - \varepsilon_c$ 模型	136
5.2.2 雷诺质流 $\overline{u'_i c'}$ 模型	143



符号说明	148
参考文献	149
<b>第 6 章 计算传质学的应用(II)——化学吸收过程及吸附过程</b>	<b>152</b>
6.1 化学吸收过程	152
6.1.1 传质扩散 $\overline{c'^2} - \varepsilon_c'$ 两方程数学模型	153
6.1.2 CO <sub>2</sub> 的 MEA 水溶液化学吸收过程模拟及验证	156
6.1.3 CO <sub>2</sub> 的 AMP 水溶液化学吸收过程模拟及验证	168
6.1.4 CO <sub>2</sub> 的 NaOH 水溶液化学吸收过程模拟及验证	172
6.2 吸附过程	178
6.2.1 吸附过程的数学模型	179
6.2.2 模型计算策略	184
6.2.3 模拟结果与实验的验证	185
符号说明	192
参考文献	195
<b>第 7 章 计算传质学的应用(III)——固定床催化反应过程</b>	<b>197</b>
7.1 模拟对象: 壁冷式固定床催化反应器	197
7.2 数学模型	199
7.2.1 $\overline{c'^2} - \varepsilon_c'$ 两方程模型	199
7.2.2 源项的确定	202
7.2.3 边界条件	203
7.3 模拟结果与实验结果的比较	204
符号说明	211
参考文献	212
<b>第 8 章 传质理论及多组分系统的传质</b>	<b>213</b>
8.1 早期经典的传质理论	213
8.1.1 双膜理论	213
8.1.2 渗透理论	214
8.1.3 表面更新理论	215
8.1.4 经典传质理论的发展	216
8.2 近界面的传质理论	217
8.2.1 湍流扩散传质理论	217
8.2.2 旋涡传质理论	218
8.3 基于界面状态的传质理论	219
8.3.1 界面效应理论	219
8.3.2 界面阻力理论	220
8.4 两组分体系传质系数的估计	221
8.5 多组分系统的质量传递方程	222

8.5.1	普遍化的 Fick 定律	223
8.5.2	普遍化的 Maxwell-Stefan 方程	223
8.6	多组分质量传递方程的求解	226
8.6.1	与膜理论相结合的 Maxwell-Stefan 方程解法	226
8.6.2	结合渗透理论的 Maxwell-Stefan 方程解法	231
8.7	多组分质量传递方程的应用示例——精馏塔板上传质点效率的计算	238
8.7.1	Oldershaw 塔板上的点效率模型	241
8.7.2	Oldershaw 塔板上的点效率计算	245
8.7.3	组分交互作用现象	257
	符号说明	258
	参考文献	260
<b>第 9 章</b>	<b>气液传质过程的界面效应</b>	<b>263</b>
9.1	Marangoni 对流结构的实验观测	267
9.1.1	传质界面为水平及液体为静止情况下的结构	268
9.1.2	传质界面为水平及液体流动情况下的结构	272
9.1.3	传质界面为垂直(降膜)及液体流动情况下的结构	272
9.1.4	化学吸收界面的结构	273
9.2	Marangoni 对流的分析	276
9.3	产生 Marangoni 对流的数学模拟	277
9.3.1	数学模型	277
9.3.2	过程稳定性分析及失稳的临界 Marangoni 数	280
9.4	气液界面 Marangoni 效应强化传质的理论分析	282
9.5	气液界面 Marangoni 效应的传质增强实验	286
9.5.1	界面为静止水平的传质增强实验	286
9.5.2	界面为垂直流动(降膜)的传质增强实验	288
9.6	从界面有序到无序过渡	290
9.7	考虑 Marangoni 效应的传质理论	293
9.8	Rayleigh 对流的数学模拟	298
9.8.1	数学模型	298
9.8.2	模拟求解结果及分析	301
9.9	Rayleigh 对流的测量	308
9.10	气液界面上二维浓度分布的模拟与观测	311
9.10.1	界面上二维平面状态的模拟	311
9.10.2	界面浓度梯度的观测	314
9.11	在可变形界面同时进行传质与传热的 Marangoni 效应	315
9.12	气液传质界面效应的产生过程	324
	符号说明	325
	参考文献	327

<b>第 10 章 格子-Boltzmann 方法对气液界面传质过程的模拟</b>	<b>329</b>
10.1 格子-Boltzmann 方法简介	329
10.1.1 从格子-气方法到格子-Boltzmann 方法	329
10.1.2 格子-Boltzmann 方法基本方程	330
10.1.3 格子模型	331
10.1.4 边界条件	333
10.1.5 计算步骤	335
10.1.6 有外力影响的格子-Boltzmann 方程	335
10.1.7 传热过程的格子-Boltzmann 方法	336
10.1.8 传质过程的格子-Boltzmann 方法	338
10.1.9 格子模型计算与实际对象的关系	339
10.1.10 格子-Boltzmann 方法的应用	339
10.2 溶质从界面向主体扩散的格子-Boltzmann 模拟	340
10.2.1 数学模型	340
10.2.2 界面上单个溶质高浓度点的扩散过程	341
10.2.3 系统物性对界面溶质扩散的影响	343
10.2.4 界面上均布的多个溶质高浓度点的扩散过程	347
10.2.5 界面上非均布的多个溶质高浓度点的扩散过程	349
10.2.6 界面上随机的溶质高浓度点扩散过程	350
10.2.7 界面瞬时传质通量与渗透理论比较	351
符号说明	353
参考文献	355
<b>附录</b>	
附录 1 填料塔内传质系数和传质表面积的经验关联式	357
附录 2 传质系数数据库	364
附录 3 散堆填料塔内气液两相逆流操作总持液量的关联式	380
附录 4 平衡分布函数离散方程的推导	382
附录 5 格子-Boltzmann 模型导出 Navier-Stokes 方程	386

# 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在建立简单的数学模型基础上，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准数关联，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、能量消耗等操作费用增加。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、温度场的预测以及用于工业设备设计。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。

计算传质学中过程计算的开展是采用  $\overline{c'^2} - \varepsilon_v$  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  $\overline{u'c'}$  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。书中第 1、2 章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；第 3 章给出计算传质学的基本方程；第 4 章介绍建立气液过程数值模拟的几种模式，其中以精馏过程的计算流体力学模拟为例予以说明；第 5、6、7、8 章分别为计算传质学在精馏、化学吸收、吸附以及固定床催化反应过程的应用举例，以及多组分传质的计算；第 9、10 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。



# 第 1 章 相关学科领域(一): 计算流体力学基础

计算流体力学是在流体动力学、数值计算方法和计算机技术的基础上建立起来的。它是用数值方法来求解描述流体运动的微分方程组,从而求出速度分布(速度场)以及与流动有关参数的分布。计算流体力学所用的方法不是寻求有关微分方程组的数学解析解,而是将微分方程离散化为数量很多的微元,然后用数值方法求解。

## 1.1 动量守恒方程及其封闭

在计算流体力学中,对牛顿型流体需要求解的方程是连续性方程和动量守恒方程(Navier-Stokes 方程)。对于不可压缩流体,它的三维基本形式为:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad i = i, j, k \quad (1-1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \rho S_i \quad (1-2)$$

式中流速  $u_i$ ; 压力  $p$  均为瞬时量;  $\mu$  为流体黏度;  $S_i$  是广义的质量力。上式求解方法可以是对其直接进行数值计算,即直接数值模拟,但由于计算机资源的限制,迄今为止只能求解低雷诺数的简单湍流问题。对于非直接的数值模拟有多种方法,如雷诺平均法、大涡模拟法等,其中以雷诺平均法应用最广,故在本章中主要介绍它的基本知识。

雷诺平均法是在湍流情况下将任何一点处的瞬时量分解为两部分:一部分是时均量,它不随时间而变化;另一部分是脉动量,它在时均量的上下波动。这样瞬时量就可以表示成时均量和脉动量之和:

$$\begin{aligned} u_i &= U_i + u'_i \\ p &= P + p' \end{aligned}$$

式中  $U_i$  为时均速度;  $u'_i$  及  $p'$  分别为脉动速度和脉动压力。将上式代入方程(1-1)及(1-2),并进行时均化后,可以得到相应的时均连续性方程和时均动量方程如下:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1-3)$$

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i U_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial (-\overline{\rho u'_i u'_j})}{\partial x_j} + \rho S_i \quad (1-4a)$$



当  $\rho$  为常数, 可有  $\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0$ , 故上式常写作:

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial \rho U_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial(-\overline{\rho u'_i u'_j})}{\partial x_j} + \rho S_i \quad (1-4b)$$

雷诺 (Osborne Reynolds) 早年提出湍流的现象, 故在湍流情况下的(1-4)式称为雷诺应力方程, 因为在方程中出现了湍流脉动量  $-\overline{\rho u'_i u'_j}$ , 它的量纲与应力相同, 故称为雷诺应力 (或确切地说, 湍流脉动应力), 它属于新的未知量。在上述方程中, 除了  $U_i (i=U, V, W)$  及  $P$  4 个未知量外, 新增加了雷诺应力未知量  $-\overline{\rho u'_i u'_j}$ , 它包含 6 个独立应力分量。若  $u'_i, u'_j, u'_k$  分别以  $u', v', w'$  表示, 则有  $-\overline{\rho u'^2}, -\overline{\rho v'^2}, -\overline{\rho w'^2}, -\overline{\rho u'v'}, -\overline{\rho u'w'}, -\overline{\rho v'w'}$  共 6 个未知量; 而求解的方程只有 3 个运动方程及 1 个连续性方程, 这样未知量数和方程数不相等, 就造成了 Navier-Stokes 方程的不封闭, 需要建立新的方程才能使方程数与未知量数相匹配, 从而能够求解。

为了进一步寻求雷诺应力  $-\overline{\rho u'_i u'_j}$  即未知量  $\overline{u'_i u'_j}$  的方程, 可将(1-2)式减去(1-4b)式, 得到  $u'_i$  脉动方程如下:

$$\frac{\partial \rho u'_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial \rho u'_i}{\partial x_j} + u'_j \frac{\partial \rho U_i}{\partial x_j} = \frac{\partial p'}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho (u'_i u'_j - \overline{u'_i u'_j}) \quad (1-5)$$

同样可得  $u'_j$  的脉动方程。以  $u'_j$  乘  $u'_i$  的脉动方程, 再以  $u'_i$  乘  $u'_j$  的脉动方程, 然后两式相加并进行平均运算, 经过整理后可得到下式, 称为雷诺应力输运方程:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{\rho u'_i u'_j}}{\partial t} + U_k \frac{\partial \overline{\rho u'_i u'_j}}{\partial x_k} = & -\frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u'_i u'_j u'_k} + \delta_{jk} \overline{u'_i p'} + \delta_{ik} \overline{u'_j p'}) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \mu \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_k} \right) - \\ & \overline{\rho u'_i u'_k} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} - \overline{\rho u'_j u'_k} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} + p' \overline{\left( \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)} - 2\mu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}} \end{aligned} \quad (1-6)$$

式中  $\delta$  为 Kronecker 符号, 即

$$\delta_{ik} = \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases} \quad \delta_{jk} = \begin{cases} 1, & j = k \\ 0, & j \neq k \end{cases}$$

在(1-6)式中, 左边两项代表雷诺应力在时间及平均流速下的增长率, 右边第一项为湍流扩散项, 第二项为分子扩散项, 第三项及第四项为应力产生项, 第五项为压力应变项, 第六项为耗散项。

雷诺应力输运方程虽然是添加的方程, 可以按下标写出 6 个方程, 但又出现一个新的脉动的 3 阶项  $\overline{u'_i u'_j u'_k}, \overline{u'_i p'}, \mu \frac{\partial \overline{u'_i}}{\partial x_k} \frac{\partial \overline{u'_j}}{\partial x_k}$  未知量, 仍然是未知量数目多于方程数, 方程组