

目录

第一章 Momentum Transport	1
1.1 基本数学知识	1
1.1.1 大学白学了	1
1.1.2 矢量计算	1
1.1.3 Gauss 散度定理	1
1.1.4 Leibniz 积分法则	1
1.1.5 Reynolds 输送定理	2
1.2 无量纲数	2
1.3 常见物理量	3
1.4 随体导数	4
1.5 连续性方程	4
1.6 动量传递	4
1.6.1 Non-Conservative Form	4
1.6.2 Conservative Form	4
1.7 应力张量	5
1.7.1 Surface Forces	5
1.7.2 Body Forces	5
1.8 牛顿流体的应力张量和动量方程	5
1.9 通用的守恒方程	5
1.10 FVM 有限体积法	6
1.10.1 对流-扩散问题的离散方式	6
1.10.2 压力速度耦合	6
1.11 自然对流 natural convection	6
1.12 真空系统	7
1.13 高马赫数流动	8
1.14 多孔介质流动	8
1.14.1 渗透率	9
1.14.2 Forchheimer's Equation	9
1.14.3 Brinkman's Equation	9
1.14.4 填充床的孔隙率	10
第二章 Mass Transport	11
2.1 多组分质量传递基本概念	11
2.2 Mass diffusivity	12
2.3 Thermal Diffusion/Soret effect	12
2.4 浓物质传递	13

2.4.1	Maxwell-Stefan Description	13
2.4.2	Mixture-Averaged Approximation	13
2.4.3	Fick's law	13
2.5	多组分扩散系数	14
2.6	化学吸附	14
2.7	多孔介质质量传递	15
2.8	化学反应	15
第三章	Thermodynamics	16
3.1	状态方程和常见物理量	16
3.2	总能量方程	16
3.3	能量传递	17
3.3.1	能量守恒	17
3.4	Boussinesq 近似	18
3.5	传热系数 The heat transfer coefficients	19
3.6	多孔介质传热	19
3.6.1	多孔介质局部热平衡理论 Local Thermal Equilibrium	19
3.6.2	多孔介质非等温流中的压力功和粘性耗散	20
3.6.3	热分散 Thermal Dispersion	21
第四章	Numerical Analysis	22
4.1	数值微分和数值积分	22
4.1.1	Taylor's Formula	22
4.1.2	有限差分	22
4.2	Newton Cotes 数值积分	22
4.3	Gauss 数值积分	23

第一章 Momentum Transport

1.1 基本数学知识

1.1.1 大学白学了

$$\frac{d}{dx}(uv) = u \frac{dv}{dx} + v \frac{du}{dx}$$

1.1.2 矢量计算

几个基本的等式：

$$\nabla s = \frac{\partial s}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial s}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial s}{\partial z} \mathbf{k}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}$$

$$\nabla^2 \mathbf{u} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}$$

$$\nabla \cdot (s\mathbf{u}) = s\nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla s$$

1.1.3 Gauss 散度定理

整个控制体内的源汇项 = 控制体表面的净通量：

$$\int_V (\nabla \cdot \mathbf{u}) dV = \int_S (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dS \quad (1.1)$$

1.1.4 Leibniz 积分法则

给出了一个对积分变量为函数的积分求导的法则，右侧第一项解释了积分随时间的变化，二三两项区域内物理量的得失。

$$\frac{d}{dt} \int_{a(t)}^{b(t)} \phi(x, t) dx = \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial \phi}{\partial t} dx + \phi(b(t), t) \frac{\partial b}{\partial t} - \phi(a(t), t) \frac{\partial a}{\partial t} \quad (1.2)$$

对由面 $S(t)$ 包围的封闭三维空间 $V(t)$ 来讲，假设面的移动速度为 \mathbf{v}_s ，有如下积分法则：

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \phi dV = \int_{V(t)} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \int_{S(t)} \phi (\mathbf{v}_s \cdot \mathbf{n}) dS \quad (1.3)$$

若控制体不移动，则：

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \phi dV = \int_{V(t)} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV \quad (1.4)$$

1.1.5 Reynolds 输送定理

Reynolds 输送定理可用来定量地描述流场中流体性质的变化情形，譬如在一个控制容积 (Control volume) 之中含有某种流体。在经过一段时间之后，若控制容积中流体的总体性质 B 有所改变，则其变化必定是下列两种原因所造成的：

(1) 总体性质 B 可能会因为本身的特性或外在因素的影响而产生随时间的变化，譬如流体中含有某种化学物质，该物质会因化学反应造成其质量 B 的变化， dB/dt 即为该物质质量的变化率。又譬如 B 为流体的动量，在受到外力的状况下，流体的动量会有所改变；

(2) 因为流体流动所造成的变化：当流体流经控制容积时，会带入或带出一部份的物质。当流出控制容积的总体性质大于流入量，则净流出量为正，会造成控制容积之中该总体性质的减少；反之，流入量大于流出量便会造成该总体性质的增加。

对固定控制体来讲：

$$\left(\frac{dB}{dt} \right)_{MV} = \int_V \frac{\partial}{\partial t} (b\rho) dV + \int_S b\rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS \quad (1.5)$$

运用 Gauss 散度定理 (式 1.1) 简化形式：

$$\left(\frac{dB}{dt} \right)_{MV} = \int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho b) + \nabla \cdot (\rho b \mathbf{v}) \right] dV \quad (1.6)$$

配合随体导数和矢量计算可写成：

$$\left(\frac{dB}{dt} \right)_{MV} = \int_V \left[\frac{D}{Dt} (\rho b) + \rho b \nabla \cdot \mathbf{v} \right] dV \quad (1.7)$$

1.2 无量纲数

Reynolds Number, 定义为惯性力和粘性力的比：

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu}$$

Grashof Number, 定义为浮力和粘性力的比， ν 为动力粘度：

$$Gr = \frac{g\beta\Delta TL^3}{\nu^2}$$

Prandtl Number, 定义为动量扩散率和热扩散率之比 (也代表流动边界层和热边界层之比)， k 为导热系数， α 为热扩散系数， ν 为动力粘度。随着 Pr 增大，热对流的增大速率逐渐比热传导大：

$$Pr = \frac{\mu c_p}{k} = \frac{\mu/\rho}{k/\rho c_p} = \frac{\nu}{\alpha}$$

Péclet Number, 定义为对流传递速率与扩散传递速率之比， D 为质量扩散系数：

$$Pe = \begin{cases} \frac{\rho UL c_p}{k} = \frac{UL}{\alpha} = Re Pr & \text{for heat transfer} \\ \frac{UL}{D} = Re Sc & \text{for mass transfer} \end{cases}$$

Schmidt Number, 定义为动量扩散率和质量扩散率之比：

$$Sc = \frac{v}{D}$$

Nusselt Number, 定义为对流和热传导之比:

$$Nu = \frac{hL}{k}$$

Mach Number, 定义为速度和介质中声速之比:

$$M = \frac{|\mathbf{v}|}{a}$$

声速由下式计算, 其中 $\gamma = c_p/c_v$ 为比气体常数:

$$a = \sqrt{\gamma \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T}$$

对理想气体而言, 简化如下:

$$a = \sqrt{\gamma RT}$$

Eckert Number, 动能和焓之比。如果 $Ec \ll 1$, 能量方程中的粘性耗散和压力功就可以忽略 (事实上这个无量纲数就是为了表明, 在速度不太高的情况下, 可压缩流体的粘性耗散和压力功可以忽略):

$$Ec = \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{c_p \Delta T}$$

Froude number, 定义为特征速度和重力波速度之比, 用来表征固体在流体中运动的情况, Fr 越高意味着固体所受阻力越大:

$$Fr = \frac{U}{\sqrt{gL}}$$

Weber Number, 定义为惯性力和表面张力之比:

$$We = \frac{\rho U^2 L}{\sigma}$$

1.3 常见物理量

粘度 μ , 单位 Pa s^{-1} , 定义为剪应力与剪切速率之比。

$$\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial y}$$

动力粘度, 单位 $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$, 定义为粘度与密度的比值。

$$\nu = \frac{\mu}{\rho}$$

1.4 随体导数

微元中的物理量 ϕ 是位置和时间的函数，单位质量的物理量的变化率 $D\phi/Dt$ 定义为：

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \frac{\partial\phi}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial\phi}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial\phi}{\partial z} \frac{dz}{dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + u \frac{\partial\phi}{\partial x} + v \frac{\partial\phi}{\partial y} + w \frac{\partial\phi}{\partial z} = \left[\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi \right] \quad (1.8)$$

守恒方程的通用形式为：

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi \mathbf{u}) = 0 \quad (1.9)$$

1.5 连续性方程

由随体导数很容易推导关于物理量密度 ρ 的守恒方程：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0 \quad (1.10)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1.11)$$

1.6 动量传递

1.6.1 Non-Conservative Form

由随体导数的 Reynolds 输送定理可推导出：

$$\int_V \left[\frac{D}{Dt}(\rho \mathbf{u}) + (\rho \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u}) - \mathbf{f} \right] dV = 0 \quad (1.12)$$

即：

$$\frac{D}{Dt}(\rho \mathbf{u}) + (\rho \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u}) = \mathbf{f} \quad (1.13)$$

用微积分基本定理拆开，发现 2、3 两相就是连续性方程（不信自己拆），等于 0：

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt}(\rho \mathbf{u}) + \underbrace{\mathbf{u} \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u}} = \mathbf{f} \quad (1.14)$$

然后得到非守恒形式的动量方程，其中 \mathbf{f} 为各种力：

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right] = \mathbf{f} \quad (1.15)$$

1.6.2 Conservative Form

用那个 Gauss 散度定理推出的 Reynolds 输送定理可推导出：

$$\int_V \left[\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) - \mathbf{f} \right] dV = 0 \quad (1.16)$$

即：

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \mathbf{f} \quad (1.17)$$

写成常见的守恒形式，左边的为各种力 \mathbf{f} ，其中 τ 为应力张量， F 为体积力：

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla \cdot p \mathbf{I} + \nabla \cdot \tau + F \quad (1.18)$$

1.7 应力张量

动量方程中主要包括两种力，表面力（压力、粘性力）和体积力（重力等）。

1.7.1 Surface Forces

主要是压力和粘性剪应力。压力为正应力 τ_{ii} ，使有限控制体体积发生变化；粘性剪应力为切应力 τ_{ij} ，使有限控制体形状发生改变，但是体积不变；

故，应力张量可分为两个部分：

$$-p \mathbf{I} + \tau$$

1.7.2 Body Forces

重力：

$$\mathbf{f}_b = \rho \mathbf{g}$$

由旋转引起的 Coriolis forces 和 Centrifugal forces

1.8 牛顿流体的应力张量和动量方程

对牛顿流体来讲，应力张量是剪应力的线性函数。

$$\tau = \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) + \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \quad (1.19)$$

对不可压流体来说 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ ，动量方程的一般为：

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p \mathbf{I} + \nabla \cdot (\mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)) + F \quad (1.20)$$

如果粘度为常数（一般等温会出现这种情况），动量守恒可进一步简化。无粘流体直接去掉粘度了事：

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p \mathbf{I} + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + F \quad (1.21)$$

1.9 通用的守恒方程

增加率 + 净流出 = 扩散增加率 + 源项

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}}_{\text{unsteady term}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u})}_{\text{convection term}} = \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi)}_{\text{diffusion term}} + \underbrace{S}_{\text{source term}} \quad (1.22)$$

在有限体积法中，会在整个控制体内对方程积分：

$$\int_{CV} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_{CV} \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u}) dV = \int_{CV} \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV + \int_{CV} S dV \quad (1.23)$$

然后用 Gauss 散度定理将对流-扩散项从体积分改为面积分，同时用式 1.4 所示的 Leibniz 积分法则改写第一项。

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{CV} \rho \phi dV \right) + \int_A \mathbf{n} \cdot (\rho \phi \mathbf{u}) dV = \int_A \mathbf{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV + \int_{CV} S dV \quad (1.24)$$

有限体积法的积分方程具有非常自然的物理意义，左边第一项表示物理量 ϕ 在控制体中的变化率，左边第二项表示控制体面上的净流出量（即对流项），右边第一项表示扩散引起的增量，最后一项为源-汇项。

对于稳态问题，时间导数为 0：

$$\int_A \mathbf{n} \cdot (\rho \phi \mathbf{u}) dV = \int_A \mathbf{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV + \int_{CV} S dV \quad (1.25)$$

对瞬态问题，需要在每一个时间步内进行积分：

$$\int_{\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{CV} \rho \phi dV \right) + \int_{\Delta t} \int_A \mathbf{n} \cdot (\rho \phi \mathbf{u}) dV = \int_{\Delta t} \int_A \mathbf{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV + \int_{\Delta t} \int_{CV} S dV \quad (1.26)$$

1.10 FVM 有限体积法

基本思路：

1. 将计算区域划分为一系列不重复的控制体积，每一个控制体积都有一个节点作代表，将待求的守恒型微分方程在任一控制体积及一定时间间隔内对空间与时间作积分；
2. 对待求函数及其导数对时间及空间的变化型线或插值方式作出假设；
3. 按选定的型线作出积分并整理成一组关于节点上未知量的离散的代数方程，使用代数方法求解。

1.10.1 对流-扩散问题的离散方式

- 一阶迎风** 一阶精度，绝对稳定，假设界面上的物理量和上游的物理量一样。可以获得物理上能接受的解，但当 Pe 数较大时，假扩散比较严重，需要加密网格；
- 二阶迎风** 二阶精度，绝对稳定，边界上的物理量由上游的两个点插值得出。通用存在假扩散；
- QUICK** 其对流项有三阶精度（用了三个数据点插值），扩散项仅有二阶精度（通常等于中心差分）；需要使用结构化网格（六面体或四面体网格）才能发挥高阶精度的优势。

1.10.2 压力速度耦合

- SIMPLE** robust，一般只用于求解不可压缩流动，需要先假定一个压力，然后计算速度，最后循环修正压力和速度直至收敛；
- SIMPLEC** SIMPLE 的改进算法，能更快的收敛；
- PISO** 常用于瞬态计算，对瞬态计算效率较高

1.11 自然对流 natural convection

自然对流由浮力引起，密度差越大，浮力越大。

在强制对流里面，使用 Re 数来描述流动行为，其表示惯性力（the inertial forces）与粘性力（the viscous forces）之比。对于内部驱动的流动行为——比如自然对流，初始速度未知，无法使用 Re 数表征流动行为。通常用 The Grashof number 来描述自然对流，其表示流体浮力与粘性力的比值（It describes the ratio of the time scales for viscous diffusion in the fluid and the internal driving force (the buoyancy force).）。当 $Gr > 10^9$ 时，自然对流转变为湍流。

对湿空气来讲，密度依赖于温度和含水率， Gr 数定义如下：

$$Gr = \frac{g\rho(\rho_{ext} - \rho_s)L^3}{\mu^2} \quad (1.27)$$

ρ_s 代表热表面的密度 (solid)， ρ_{ext} 代表 the free stream density， ρ 代表流体密度。

对干空气来讲，密度仅依赖于温度， Gr 数定义如下：

$$Gr = \frac{g\beta(T_s - T_{ext})L^3}{(\mu/\rho)^2} \quad (1.28)$$

通常， $\mu/\rho = \nu$ ，定义为动力粘度。

β 为热膨胀系数 (the coefficient of thermal expansion)，定义为：

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_T \quad (1.29)$$

对理想气体而言， β 简化为：

$$\beta = \frac{1}{T} \quad (1.30)$$

同样，The Rayleigh number 也可以用来表征自然对流， Ra 数定义如下：

$$Ra = GrPr = \frac{g\beta\rho^2 C_p |T - T_{ext}| L^3}{k\mu} \quad (1.31)$$

其中， Pr 为 The Prandtl number，定义为：

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{c_p \mu}{k} \quad (1.32)$$

α 为热扩散系数，定义为：

$$\alpha = \frac{k}{\rho c_p} \quad (1.33)$$

若密度仅仅依赖于温度， Ra 数定义如下：

$$Ra = \frac{g\rho C_p |\rho_{ext} - \rho_s| L^3}{k\mu} \quad (1.34)$$

1.12 真空系统

真空系统的气体流动需要使用与传统流体流动问题不同的物理方程来描述。在低压环境下，气体分子的平均自由程与系统的尺度相当，气体的稀薄效应变得很重要。通常情况下，稀薄度可以通过克努森数¹来描述，分辨真空系统中是使用统计力学还是连续介质假设来描述流体流动。

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (1.35)$$

其中 λ 为是气体分子的平均自由程， L 为系统的特征尺寸。在动力学理论 (kinetic theory) 中，分子的平均自由程²指分子在与其他分子碰撞之间行进的距离，其中 k_B 为玻尔兹曼常数， d 为分子直径。

$$\lambda = \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi d^2 p} \quad (1.36)$$

表 1.1 显示了不同 Kn 数下的流型及系统适用的控制方程。

表 1.1 Knudsen 数与流体流动类型

Kn 数	流动类型
$Kn < 0.01$	连续介质假设, 使用 Navier-Stokes 方程和传统的计算流体力学方法
$0.01 < Kn < 0.1$	滑移流, Navier-Stokes 方程, 壁面处使用滑移边界条件来模拟克努森层
$0.1 < Kn < 10$	过渡流, 大部分流体区域都属于克努森层, 必须使用稀薄气体动力学方法
$Kn > 10$	分子流, 气体分子只与流体域的表面相互作用, 分子之间没有散射现象

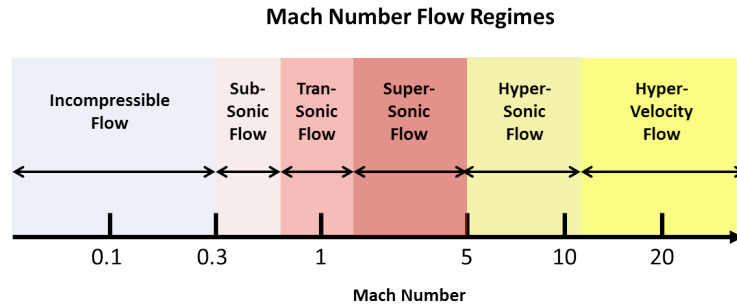


图 1.1 Mach-Number-Flow-Regimes

1.13 高马赫数流动

马赫数的定义常见维基百科³。马赫数从 1.2 ~ 5.0 为超音速区, 超音速流通过收缩管道时减速、压缩, 通过扩散管道时, 增速、膨胀。而亚音速流通过收缩管道时, 则现象完全相反。

高马赫数流动必须考虑粘性耗散 (Viscous dissipation) 和压力功 (pressure work), 模拟高马赫数流动现象必须结合考虑动量和能量传递。在流动过程中热导率 k 和粘度 μ 的变化按理想气体假设来计算。一般使用 Sutherland's Law。

$$k = k_{ref} \left(\frac{T}{T_{k,ref}} \right)^{3/2} \frac{T_{k,ref} + S_k}{T + S_k} \quad (1.37)$$

其中, k_{ref} 为参考条件下的热导率 ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$), $T_{k,ref}$ 为参考条件下的温度 (K), S_k 为 Sutherland 常数 (K, 每种气体都有自己的常数)。

同理, 高马赫流动流体的粘度也可使用 Sutherland's Law 来计算, 仅对低压下的单组分气体有效。

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{\mu,ref}} \right)^{3/2} \frac{T_{\mu,ref} + S_{\mu}}{T + S_{\mu}} \quad (1.38)$$

其中, μ_{ref} 为参考条件下的粘度 (Pa s^{-1}), $T_{\mu,ref}$ 为参考条件下的温度 (K), S_{μ} 为 Sutherland 常数 (K, 每种气体都有自己的常数)。

1.14 多孔介质流动

多孔介质流道所占体积分数为孔隙率 ε , 多孔介质单位截面积的体积流率称为 Darcy 速度 ($\text{m}^3 \text{s}^{-1} \text{m}^{-2}$), 孔隙内的平均速度 (m s^{-1}) 称为 The intrinsic average velocity/The average linear velocity, 其与 Darcy 速度可以通过 Dupuit-Forchheimer relationship 进行关联。为了简便, 后续方程中的 u 一般指 Darcy 速

¹https://en.wikipedia.org/wiki/Knudsen_number

²https://en.wikipedia.org/wiki/Mean_free_path

³https://en.wikipedia.org/wiki/Mach_number

度。(Darcy 速度是以整个表征体元为基础计算的, 平均速度是以孔隙为基础计算的, 所以 Darcy 速度要小)。

$$\mathbf{u}_{Darcy} = \varepsilon \mathbf{U}_{ave} \quad (1.39)$$

运用通用的守恒方程导出多孔介质流动的连续性方程:

$$\varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1.40)$$

Darcy 定律表明, 流速和压力梯度成正比, 流动的阻力主要是流体的粘性力, Darcy 适用于低 Re 的渗流情况。

$$\mathbf{u} = -\frac{\kappa}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (1.41)$$

三维情况下, Darcy 定律如下式, 其中 κ 为渗透率张量。

$$\mathbf{u} = -\frac{\kappa}{\mu} \cdot \nabla p \quad (1.42)$$

1.14.1 渗透率

渗透率是由多孔介质几何结构决定的, 对于简单和规则的几何结构, 我们能够通过几何参数来计算渗透率。对于球形颗粒填充或纤维, 渗透率与孔隙率和几何参数有如下关系:

$$\kappa = \frac{d_p^2 \varepsilon^3}{180(1 - \varepsilon)^2} \quad (1.43)$$

1.14.2 Forchheimer's Equation

当 Darcy 流速 \mathbf{u} 足够小 (通常意味着 $Re \leq 1$), 流动符合 Darcy 定律。随着流速逐渐增大, 惯性力带来的非线性曳力逐渐增强, 在 $1 \leq Re \leq 10$ 这个范围内, 惯性力的增长都比较平滑。一旦 Re 足够高, 流动的阻力将主要是流体与流道的摩擦力和惯性力。Forchheimer 方程扩展了 Darcy 定律, 适用于多孔介质内的快速流动。大量研究表明, 从 Darcy 流动到 Darcy-Forchheimer 流动的转变发生在 $Re_{local} > 100$ 时。

$$\nabla p = -\frac{\mu}{\kappa} \mathbf{u} - c_F \kappa^{-1/2} \rho |\mathbf{u}| \mathbf{u} \quad (1.44)$$

其中, c_F 为无量纲阻力系数, 根据 Beavers 等人的实验总结, 阻力系数可按式计算:

$$c_F = 0.55 \left(1 - 5.5 \frac{d}{D_e} \right) \quad (1.45)$$

其中, d 为颗粒直径, D_e 为床层等效直径, $D_e = 2wh/(w+h)$, w 为床层宽度, h 为床层高度。

除了 Forchheimer 方程外, Irmay 等人也提出了一个关联多孔介质压降的关联式, 当 $\beta = 150$, $\alpha = 1.75$ 即为著名的 Ergun 方程:

$$\frac{dp}{dx} = -\frac{\beta \mu (1 - \varepsilon)^2 u}{d_p^2 \varepsilon^3} - \frac{\alpha \rho (1 - \varepsilon) u^2}{d_p \varepsilon^3} \quad (1.46)$$

1.14.3 Brinkman's Equation

$$\rho \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{\varepsilon} \right) \right] = -\nabla p + \frac{\mu}{\varepsilon} \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{\mu}{\kappa} \mathbf{u} - \frac{c_F \rho}{\kappa^{1/2}} |\mathbf{u}| \mathbf{u} \quad (1.47)$$

1.14.4 填充床的孔隙率

大量实验表明，填充床的孔隙率是一个阻尼振荡函数，从壁面处 $\varepsilon = 1$ 振荡变化到 $5d_p$ 处接近稳定。可用经验公式描述孔隙率的变化：

$$\varepsilon = \varepsilon_{\infty} \left[1 + Ce^{\left(-N \frac{y}{d_p}\right)} \right] \quad (1.48)$$

其中， y 是距壁面的距离； C ， N 是经验参数，实验表明 $C = 1.4$ ， $\varepsilon_{\infty} = 0.4$ 时， $N = 5$ or 6 。

由于壁面附近孔隙率最大，流动过程中流速也最大，这种现象称为“沟流现象” (channeling effect)。

第二章 Mass Transport

2.1 多组分质量传递基本概念

对多组分流体混合物而言 $m = \sum m_i$, 质量浓度 (kg m^{-3}) 定义为:

$$\rho_i = \frac{m_i}{V}$$

混合物的密度即为全部物质的质量浓度之和:

$$\rho = \sum \rho_i$$

类似地, 混合物的物质的量 (mol)、质量分数 ($\sum \omega_i = 1$)、摩尔分数分别定义为:

$$n_i = \frac{m_i}{M_i}$$

$$\omega_i = \frac{m_i}{m}$$

$$x_i = \frac{n_i}{n}$$

并且有如下转换关系:

$$\rho_i = \rho \omega_i = \rho \frac{M_i}{M} x_i$$

混合物的等效摩尔质量 (kg mol^{-1}) 定义为:

$$M = \sum M_i x_i$$

如果气体混合物是理想气体, 则满足:

$$PV = nRT$$

$$PV = mR_m T$$

其中 R_m 是混合物气体参数, 定义为:

$$R_m = \frac{n}{m} R = \frac{R}{M}$$

气体 i 的分压为 P_i , 根据 Dalton 定律有:

$$P = \sum P_i$$

2.2 Mass diffusivity

扩散系数分为三类, 热扩散系数 α 、质量扩散系数 D 、动量扩散系数 ν , 单位均为 $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ 。定义 Schmidt 数为 $Sc = \nu/D$, 根据动力学理论, 理想气体的 $Sc = 1$, 故 Sc 数其主要用来表征气体与理想气体的偏差 (即表征气体的非理想性)。

浓度梯度引起分子扩散, 通常化合物在空气中的扩散系数为在水中的扩散系数的 1000 倍左右。扩散系数的国际单位为 $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ 。对气体而言, 根据动力学理论可知, 气体的扩散系数与温度和压力相关, 关系通常为 $f(T^n/p)$ (通常 $n = 3/2$), 气体的扩散系数通常随温度升高或压力下降而增大。实际上, 由于气体的非理想性, n 通常要更大, 例如水汽在空气中扩散, $n = 2.072 (250\text{K} < T < 459\text{K})$ 。

气体的二元扩散系数常用 Chapman-Enskog theory, 其中, M 为分子质量 (kg mol^{-1}), p 为压力 (Pa), σ_{ij} 为平均碰撞直径 (\AA), Ω 是一个温度相关的碰撞积分:

$$D_{AB} = 2.695 \times 10^{-3} \cdot \frac{\sqrt{T^3(M_A + M_B)/(2000M_A M_B)}}{p\sigma_A\sigma_B\Omega_D} \quad (2.1)$$

液体的二元扩散系数常用 Wilke-Chang equation, 其中 μ_B 为动力粘度 (N s m^{-2}), V_A 为正常沸点下的分子体积 ($\text{m}^3 \text{mol}^{-1}$), ϕ_B 为溶剂的无量纲关联系数, 默认为 1:

$$D_{AB} = 3.5 \times 10^{-15} \frac{(\phi_B M_B)^{1/2} T}{\mu V_A^{0.6}} \quad (2.2)$$

几个扩散系数的参照:

表 2.1 几个扩散系数参照 $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$

物质	在空气中 1atm	在水中
甲醇	1.5×10^{-5}	1.64×10^{-9}
乙醇	1.1499×10^{-5}	1.216895×10^{-9}
氧气	$1.76 \times 10^{-5} (25^\circ\text{C})$	-
苯酚	8.2×10^{-6}	9.1×10^{-10}

上面两个公式是基于分子动力学, 比较难用, 主要是涉及分子动力学的常数比较难寻找。Fuller 提出了一个气体扩散系数的经验关联式, 形如 $D_{AB} = f(T^{1.75}/p)$, 简单易用, 误差不超过 10%。详情参见文献^[1]。

$$D_{AB} = \frac{0.00143 T^{1.75}}{p M_{AB}^{1/2} \left(\sum V_A^{1/3} + \sum V_B^{1/3} \right)^2} \quad (2.3)$$

其中 D_{AB} 为二元扩散系数 (cm^2/s); T 为温度 (K), $M_{AB} = 2M_A M_B / (M_A + M_B)$; M_A , M_B 为相对分子质量 (g mol^{-1}); p 为压力 (bar)。

2.3 Thermal Diffusion/Soret effect

由温差引起的扩散称为 Soret 效应, 也称热泳 (<https://en.wikipedia.org/wiki/Thermophoresis>)。当混合物温差大、分子质量相差大时会产生热扩散, 分子质量高的物质在低温区域积累, 分子质量低的物质在高温处积累。多组分混合物所有热扩散系数之和为 0:

$$\sum_{i=1}^Q D_i^T = 0 \quad (2.4)$$

2.4 浓物质传递

由 i 个物质构成的，有 j 个反应的反应流、浓物质系统的质量守恒方程为：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega_i) + \nabla \cdot (\rho\omega_i \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_i + R_i \quad (2.5)$$

其中 ω_i 表示 i 物质的质量分数， \mathbf{j}_i 为质量通量（mass flux）源项，表示分子扩散、电场迁移、热扩散等引起的通量。

2.4.1 Maxwell-Stefan Description

Maxwell-Stefan 是最详细的扩散模型，计算消耗最大，是一个扩散占主导的模型。多组分混合物中，相对于质量平均速度的质量通量可使用通用的 Fick 方程定义，总的扩散通量依赖于物质的浓度梯度、温度、压力和外部驱动力：

$$\mathbf{j}_i = -\rho\omega_i \sum_{k=1}^Q \tilde{D}_{ik} \mathbf{d}_k - D_i^T \nabla \ln T \quad (2.6)$$

\tilde{D}_{ik} 是多组分 Fick 扩散系数， D_i^T 是热扩散系数， \mathbf{d}_k 是扩散驱动力。对理想气体而言，扩散驱动力可表示为：

$$\mathbf{d}_k = \frac{1}{cR_g T} \left[\nabla p_k - \omega_k \nabla p - \rho_k \mathbf{g}_k + \omega_k \sum_{l=1}^Q \rho_l \mathbf{g}_l \right] \quad (2.7)$$

其中， p_k 为气体分压， ρ_k 为物质 k 的密度， \mathbf{g}_k 为作用于物质 k 的外部作用力（例如电场）。

2.4.2 Mixture-Averaged Approximation

Mixture-Averaged 模型假定分压和温度变化对多组分扩散的影响可以忽略，假定由分子扩散引起的质量通量符合 Fick 定律，则分子扩散通量正比于摩尔分数的梯度，定义为：

$$\mathbf{j}_{md,i} = -\rho_i D_i^m \frac{\nabla x_i}{x_i} \quad (2.8)$$

$$\mathbf{j}_{md,i} = - \left(\rho D_i^m \nabla \omega_i + \rho \omega_i D_i^m \frac{\nabla M}{M} \right) \quad (2.9)$$

$$\rho_i = \rho \omega_i, x_i = \frac{\omega_i}{M_i} M \quad (2.10)$$

其中，混合物平均扩散系数定义为：

$$D_i^m = \frac{1 - \omega_i}{\sum_{k \neq i}^N \frac{x_k}{D_{ik}}} \quad (2.11)$$

2.4.3 Fick's law

Fick's law 是一个通用的模型，通常用来描述分子扩散不占主导地位的系统，不需要多组分扩散系数，计算消耗最低。

2.5 多组分扩散系数

Maxwell-Stefan 扩散系数 D_{ik} , Fick 扩散系数 D_w^F , 热扩散系数 D_w^T 。

二元 Fick 扩散系数是对称的 (symmetric), 其和 Maxwell-Stefan 扩散系数 D_{ik} 可以相互转换。

$$\tilde{D}_{ik} = \tilde{D}_{ki} \quad (2.12)$$

2.6 化学吸附

化学吸附只能发生在固体表面的活性位点 σ 上, 定义被 A 覆盖的活性位点与总活性位点之比为吸附率, 剩下的为空位率:

$$\theta_A = \frac{\sigma_A}{\sigma} \quad (2.13)$$

$$\theta_V = 1 - \theta_A \quad (2.14)$$

分子的吸附速率 r_{ads} 与表面空位率和气体分压成正比, 解吸率与表面占有率成正比:

$$r_{ads} = k_{ads} p_A \theta_V \quad (2.15)$$

$$r_{des} = k_{des} \theta_A \quad (2.16)$$

达到吸附平衡时, 表观速率 $r = r_{ads} - r_{des} = 0$, 有:

$$k_{ads} p_A (1 - \theta_A) = k_{des} \theta_A$$

令 $K_A = \frac{k_{ads}}{k_{des}}$, 称为吸附平衡常数, 得式 2.17, 称为 Langmuir 吸附等温式:

$$\theta_A = \frac{K_A p_A}{1 + K_A p_A} \quad (2.17)$$

为了根据本体浓度 c 和表面浓度 c_s 来建立传递和反应方程, 执行以下代换, 其中 Γ_s 为表面得最大吸附浓度:

$$\theta_A = c_s / \Gamma_s$$

$$p_A = cRT$$

将得到下式, 粗体为吸附和脱附反应速率常数。

$$r_{ads} = \frac{\mathbf{k}_{ads} RT}{\Gamma_s} c (\Gamma_s - c_s) \quad (2.18)$$

$$r_{des} = \frac{\mathbf{k}_{des}}{\Gamma_s} c_s \quad (2.19)$$

对于表面来讲, 涉及表面扩散、吸附脱附、表面反应, 质量守恒为:

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_s \nabla c_s) = r_{ads} - r_{des} = R \quad (2.20)$$

本体溶液的质量守恒用经典的对流扩散方程描述:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla c + \mathbf{u}c) = R \quad (2.21)$$

2.7 多孔介质质量传递

对每一个组分应用质量守恒定律，并忽略源汇项，得出基于质量浓度的单组分质量守恒方程：

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{U}_i) = 0 \quad (2.22)$$

将方程中的质量浓度和内在平均速度汇总，得出全部组分的质量守恒方程：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\sum \rho_i \mathbf{U}_i) = 0 \quad (2.23)$$

使用 $\mathbf{U} = \frac{1}{\rho} \sum \rho_i \mathbf{U}_i$ 表示质量平均速度，得出：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (2.24)$$

我们定义物质 i 相对于质量平均速度的运动为扩散 (diffusion)， $\mathbf{U}_i - \mathbf{U}$ 为扩散速度，则扩散通量为：

$$\mathbf{j}_i = \rho_i (\mathbf{U}_i - \mathbf{U}) \quad (2.25)$$

则，考虑对流-扩散的单组分质量守恒方程为：

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{U}) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_i \quad (2.26)$$

根据 Fick 定律， $\mathbf{j}_i = -D \nabla \rho_i$ ，在上式两端同时乘上孔隙率 ε 以考虑多孔介质内的质量传递：

$$\varepsilon \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \varepsilon \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{U}) = \varepsilon \nabla \cdot (D \nabla \rho_i) \quad (2.27)$$

运用 Dupuit-Forchheimer relationship，考虑多孔介质内部的有效扩散系数，并将上式改写为关于摩尔浓度：

$$\varepsilon \frac{\partial c_i}{\partial t} + \varepsilon \nabla \cdot (c_i \mathbf{u}) = \varepsilon \nabla \cdot (D_{eff} \nabla c_i) \quad (2.28)$$

2.8 化学反应

化学反应速率表达式一般为：

$$\frac{dc}{dt} = -kc^n \quad (2.29)$$

反应速率常数常常于温度和活化能相关，一般由 Arrhenius relationship 给出：

$$k = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2.30)$$

和温度相关的 Arrhenius 表达式一般为：

$$k = A \left(\frac{T}{T_{ref}}\right) \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2.31)$$

第三章 Thermodynamics

强度量：与物质的量无关的物理量，压力 p ，温度 T 。

广延量：与物质的量有关的物理量，具有可加性，质量 m ，容积 V ，内能 E ，焓 H ，熵 S 。

比参数：将广延量化为强度量，让其与物质的量无关，方便比较。

3.1 状态方程和常见物理量

经典理想气体状态方程：

$$pV = nRT \quad (3.1)$$

从式 3.1 推导出理想气体密度公式：

$$\rho = \frac{Mp}{RT} = \frac{p}{R_s T} \quad (3.2)$$

对理想气体而言，各物理性质是压力 p 和温度 T 的函数，如 $\rho(p, T)$ 、 $c_p(p, T)$ 、 $\mu(T)$ 、 $k(T)$ 。

比气体常数 (Specific gas constant)：

$$R_s = \frac{R}{M} \quad (3.3)$$

$$R_s = c_p - c_v \quad (3.4)$$

定压比热容 c_p ，令的 1kg 物质的温度上升 1K 所需的能量，单位 $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ 。

比热容比 (The ratio of specific thermal capacities)，常见的双原子气体的 $\gamma = 1.4$ ，大多数液体的 $\gamma = 1.1$ ，水的 $\gamma = 1.0$ 。

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} \quad (3.5)$$

热扩散系数 (Thermal diffusivity)，其中 k 为热导率 ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)， ρ 为密度 (kg m^{-3})， c_p 为定压比热容 ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$)。

$$\alpha = \frac{k}{\rho c_p} \quad (3.6)$$

焦耳：

$$1\text{J} = 1\text{Nm} = \frac{\text{kg m}^2}{\text{s}^2} = 1\text{Ws}$$

3.2 总能量方程

能量守恒定义为绝热系统的总能量是一个常数。即总的能量不随时间变化，只能从一种形式转换为另一种形式且不能凭空消失。在 CFD 里面通常只考虑动能 (机械能) 和分子内能 (内能)。能量守恒可以表示为：

流体微团内能量的变化率 = 流入流体微团的净热流量 + 体积力和表面力对流体微团做功的功率

动能定义为:

$$K = \frac{1}{2}|\mathbf{u}|^2 \quad (3.7)$$

设单位质量的内能定义为: E , 流体微团动能和内能总和的时间变化率定义为:

$$\rho \frac{D(K + E)}{Dt} dxdydz \quad (3.8)$$

设附加热源为 Q , 流体微团的净热源为:

$$\rho Q dxdydz \quad (3.9)$$

设热通量为 $\mathbf{q} = -k\nabla T$, 热传导对流体微团的加热为:

$$-\nabla \cdot \mathbf{q} dxdydz \quad (3.10)$$

重力做功、压力和剪应力做功可以表示为:

$$\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} dxdydz \quad (3.11)$$

$$(-\nabla \cdot (p\mathbf{u}) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u})) dxdydz \quad (3.12)$$

总能量方程为 (非守恒形式):

$$\rho \frac{D(K + E)}{Dt} = \rho Q - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot (p\mathbf{u}) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}) \quad (3.13)$$

总能量方程为 (守恒形式):

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho K}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} E) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} K) = -\nabla \cdot (p\mathbf{u}) + \rho Q - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}) \quad (3.14)$$

3.3 能量传递

3.3.1 能量守恒

热力学第一定理表明, 系统 Ω 的动能 K_Ω 、内能 E_Ω 变化是由施加到系统上的机械能 P_{ext} 和热交换 Q_{exch} 引起的, 动能 K_Ω 、内能 E_Ω 和压力 (应力) P_{str} 也有一定的转换关系, 说明 P_{str} 通过耗散转化成了能量。

$$\frac{dE_\Omega}{dt} + \frac{dK_\Omega}{dt} = P_{ext} + Q_{exch} \quad (3.15)$$

$$\frac{dK_\Omega}{dt} + P_{str} = P_{ext} \quad (3.16)$$

$$\frac{dE_\Omega}{dt} = P_{str} + Q_{exch} \quad (3.17)$$

系统 Ω 的内能和内能的变化率定义如下:

$$E_\Omega = \int_\Omega E dm \quad (3.18)$$

$$\frac{E_\Omega}{dt} = \int_\Omega \frac{dE}{dt} dm = \int_\Omega \rho \frac{dE}{dt} dv \quad (3.19)$$

连续介质假设推导出压力定义为：

$$P_{str} = \int_{\Omega} (\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}) dv \quad (3.20)$$

$\boldsymbol{\sigma}$ 和 \mathbf{D} 分别为应力张量和应变速率张量。操作符 “:” 的计算法则如下：

$$\mathbf{a} : \mathbf{b} = \sum_n \sum_m a_{nm} b_{nm} \quad (3.21)$$

应力张量也可表示为 $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}$ ，所以 P_{str} 实际上是压力功 (pressure-volume work) 和粘性耗散 (viscous dissipation) 之和：

$$P_{str} = \int_{\Omega} p(\nabla \cdot \mathbf{u}) dv - \int_{\Omega} (\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u}) dv \quad (3.22)$$

系统 Ω 的热交换 Q_{exch} 是热传导、热辐射和附加热源引起的：

$$Q_{exch} = - \int_{\partial\Omega} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}) ds - \int_{\partial\Omega} (\mathbf{q}_r \cdot \mathbf{n}) ds + \int_{\Omega} Q dv \quad (3.23)$$

热平衡方程表示如下：

$$\int_{\Omega} \rho \frac{dE}{dt} dv + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}) ds + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{q}_r \cdot \mathbf{n}) ds = \int_{\Omega} (\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}) dv + \int_{\Omega} Q dv \quad (3.24)$$

基本的传热是一个典型的椭圆偏微分方程：

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = Q \quad (3.25)$$

$$\mathbf{q} = -k \nabla T \quad (3.26)$$

施加 Dirichlet 或 Neumann 边界条件以求解：

$$T = T_0 \quad (3.27)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{q} = q_0 \quad (3.28)$$

当密度 ρ ，热容 C_p ，热导率 k ，热源 Q ，边界条件均为常数时，方程是一个线性系统。

3.4 Boussinesq 近似

为了进行热对流，流体的密度必须是温度的函数 $\rho(T)$ ，因此我们需要一个状态方程来补充质量、动量、能量方程，密度状态方程为：

$$\rho_{\text{buoyancy}} = \rho_{ref}(1 - \beta(T - T_{ref})) \quad (3.29)$$

当流体受温度影响密度发生变化，但密度的变化非常小，且温度变化不足以介质的性质发生很大变化，可以使用 Boussinesq 近似来减小方程的非线性。Boussinesq 假定在流动的控制方程中除了浮力项外，其他项的密度为是常数。

Boussinesq 近似将流体看作不可压缩流体，即 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ ，密度的变化仅影响体积力源项。其动量方程为：

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + \rho_{ref}(1 - \beta(T - T_{ref}))\mathbf{g} \quad (3.30)$$

3.5 传热系数 The heat transfer coefficients

当模拟因自然对流或强制对流产生的热量传递现象时，原则上采取两种方式：1. 对表面应用传热系数，即假定与流体接触的边界上的对流热通量与热边界层上的温差成正比 $-n \cdot q = h(T_{ext} - T)$ ；2. 使用共轭传热（Conjugate Heat Transfer）或非等温流（Nonisothermal Flow）直接计算模型与周围流体的热交换。

需要注意的是，如果计算了流体的对流现象，就不要使用换热系数。（It such case using heat transfer coefficients to model convective heat transfer is not relevant. Instead, modeling the fluid as immobile is likely to be accurate.）

通常根据对流的类型（自然或强制对流）和计算域的类型（外部或内部计算域）将对流传热分为四类。在自然对流中，有温差引起的浮力（buoyancy forces）起主要作用。传热系数 h 大多是通过经验和理论关联计算得出，首先定义一些无量纲数：

The Nusselt number, $Nu = hL/k$

The Reynolds number, $Re = \rho u L / \mu$

The Prandtl number, $Pr = \mu C_p / k$

The Rayleigh number, $Ra = Gr Pr$

其中 h 为换热系数 ($\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$)， k 为导热系数 ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)。

3.6 多孔介质传热

多孔介质传热涉及流-固两相，在不考虑非等温流动过程中的压力功和粘性耗散的情况下，各项能量传递控制方程写做。

固体总的能量传递：

$$\rho_s C_{p,s} \frac{\partial T_s}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_s = Q_s \quad (3.31)$$

流体中的能量传递（忽略压力功和粘性耗散）：

$$\rho_f C_{p,f} \frac{\partial T_f}{\partial t} + \rho_f C_{p,f} \mathbf{u}_f \cdot \nabla T_f + \nabla \cdot \mathbf{q}_f = Q_f \quad (3.32)$$

流-固局部能量传递有局部热平衡和非局部热平衡两种假设。如果两相的吸热能力区别不大，大多数情况下可以假定两相温度相等。多 porous plates（多孔板？）来讲，需要结合 Sparrow number 来判断局部热平衡假设是否还适用；对 packed bed（填充床）来讲，需要结合 Darcy number 来判断。 $Sp < 100$ 或 500 ， $Da > 10^{-7}$ 时，局部热平衡假设有效。

$$Sp = \frac{h_{sf} L^2}{k_{eff} r_h} \quad (3.33)$$

$$Da = \frac{\kappa}{d^2} \quad (3.34)$$

其中 h_{sf} 为流-固传热系数 ($\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$)， L 是平板厚度 (m)， k_{eff} 是多孔介质有效热导率 ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)， r_h 是水力半径 (m)， κ 是渗透率 (m^2)， d 是颗粒直径 (m)。

3.6.1 多孔介质局部热平衡理论 Local Thermal Equilibrium

局部热平衡假设流-固两相温度一致，即：

$$T_f = T_s = T$$

对式 3.31 和式 3.32 所示的单相传热控制方程应用混合规则，固相能量传递乘上固相体积分数 θ_s ，流体相乘上流体体积分数 $1 - \theta_s$ ，多孔介质区域能量传递控制方程被整合为：

$$(\rho C_p)_{eff} \frac{\partial T_f}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T + \nabla \cdot \mathbf{q} = Q \quad (3.35)$$

$$\mathbf{q} = -k_{eff} \nabla T \quad (3.36)$$

其中 ρ 为流体密度， C_p 为流体定压热容， \mathbf{u} 是 Darcy 速度，即单位截面积的体积流率，平均线性速度 (The average linear velocity, 孔内的流速) $\mathbf{u}_f = \mathbf{u}/(1 - \theta_s)$ 。

$(\rho C_p)_{eff}$ 为多孔介质体积有效定压热容：

$$(\rho C_p)_{eff} = \theta_s \rho_s C_{p,s} + (1 - \theta_s) \rho_f C_{p,f}$$

k_{eff} 为有效热导率，取决于几何的复杂程度，有如下几种不同定义：

1. 如果热传导在流-固两相同时发生，即两相没有净传热，则使用体积平均模型，按加权算术平均值计算

$$k_{eff} = \theta_s k_s + (1 - \theta_s) k_f$$

2. 如果热传导按一定顺序依次在流-固两相发生，则使用加权调和平均值

$$\frac{1}{k_{eff}} = \frac{\theta_s}{k_s} + \frac{1 - \theta_s}{k_f}$$

3. 按加权几何平均值来算

$$k_{eff} = k_p^{\theta_s} \cdot k^{(1 - \theta_s)}$$

3.6.2 多孔介质非等温流中的压力功和粘性耗散

非等温流过程中，满足下式所示关系时，压力功效应可以被忽略：

$$\beta T L \left(\frac{g\beta}{c_{p,f}} \right) \ll 1 \quad (3.37)$$

当压力功效应不能被忽略时，需要向多孔介质的能量传递控制方程中添加压力功项：

$$(\rho C_p)_{eff} \frac{\partial T_f}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T + \nabla \cdot \mathbf{q} + \boxed{\beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla p \right)} = Q \quad (3.38)$$

同理，满足下式时，粘性耗散效应也可以被安全忽略：

$$L \left(\frac{g\beta}{c_{p,f}} \right) \ll 1 \quad (3.39)$$

Eckert Number 也可以用来判断是否可以忽略压力功和粘性耗散，详情见节 1.2。粘性耗散常常写做：

$$\phi = \frac{\mu}{\kappa} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + \frac{c_p}{\kappa^{1/2}} |\mathbf{u}| \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} - \tilde{\mu} \mathbf{u} \cdot \nabla^2 \mathbf{u} \quad (3.40)$$

Nield 等人进行了尺度分析，将粘性耗散同热扩散项比较，提出了一个用于判别粘性耗散是否可被忽略的无量纲数。结果表明，当 $N \ll 1$ 时，粘性耗散可被安全忽略。

$$N = \frac{Br}{Da} = \frac{\mu U^2 L^2}{\kappa k_{eff} \Delta T} \quad (3.41)$$

其涉及的无量纲数定义如下，其中 Da 为 Darcy number：

$$Br = \frac{Ec}{Pr} = \frac{\mu U^2}{k_{eff} \Delta T}$$

$$Ec = \frac{U^2}{c_p \Delta T}$$

$$Da = \frac{\kappa}{L^2}$$

对多孔介质内强制对流来讲，特征速度很好选择，且大多数情况下 Da 数较小，也即在中等大小的 Brinkman 数下，粘性耗散的作用非常重要，不容忽视。

对自然对流来讲，特征速度 $U \approx (k_{eff}/\rho c_p L) Ra^{1/2}$ ，当 $Ge \ll 1$ 时，可忽略自然对流过程中的粘性耗散，其中 Gebhart number 的定义为：

$$Ge = \frac{g\beta L}{c_p}$$

上述的 Nield 数在 Péclet 数不太大的情况下能有效判别强制对流中的粘性耗散是否可以忽略，如果 Péclet 数过大，Nield 数变为粘性耗散和对流运输项之比：

$$N = \frac{Ec}{Da Rec}$$

3.6.3 热分散 Thermal Dispersion

第四章 Numerical Analysis

4.1 数值微分和数值积分

当函数是初等函数时，可以使用符号计算求出其微积分，一旦函数是非初等函数，就只能使用数值计算方法了。

4.1.1 Taylor's Formula

首先看泰勒定理，其中 $c \in (x, x+h)$ ：

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \underbrace{\frac{f^{(n)}(c)}{n!}(x - x_0)^n}_{\text{remainder term}} \quad (4.1)$$

4.1.2 有限差分

首先看导数的定义：

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (4.2)$$

如果 f 二阶连续可微，泰勒展开为：

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(c) \quad (4.3)$$

得出大名鼎鼎的两点前向差分公式，其中 $c \in (x, x+h)$ ：

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2}f''(c) \quad (4.4)$$

4.2 Newton Cotes 数值积分

对定义在区间 $[a, b]$ 上的函数 f ，可计算通过函数 $f(x)$ 的一些点的插值多项式的积分来近似 $f(x)$ 的积分。

梯形法则，其中 $h = x_1 - x_0$ ， $c \in (x_0, x_1)$ ：

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}(y_0 + y_1) - \frac{h^3}{12}f''(c) \quad (4.5)$$

辛普森法则，其中 $h = x_2 - x_1 = x_1 - x_0$ ， $c \in (x_0, x_2)$ ：

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) - \frac{h^5}{12}f^{(4)}(c) \quad (4.6)$$

4.3 Gauss 数值积分

$$\int_1^1 f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n c_i f(x_i) \quad (4.7)$$

参考文献

- [1] POLING B E, PRAUSNITZ J M, JOHN PAUL O, et al. The properties of gases and liquids[M]. Vol. 5. [S.l.]: Mcgraw-hill New York, 2001.