

中文引用格式:曹莹雪,王金宵,王怡,等. 多组分气体传质简化模型理论分析及数值验证[J]. 中国安全科学学报, 2024, 34(10): 124-133.

英文引用格式:CAO Yingxue, WANG Jinxiao, WANG Yi, et al. Theoretical analysis and numerical verification of simplified mass transport model for multi-component gas [J]. China Safety Science Journal, 2024, 34(10): 124-133.

多组分气体传质简化模型理论分析及数值验证*

曹莹雪^{1,2}副教授, 王金宵², 王怡^{**1,3}教授, 黄艳秋^{1,3}教授,
李浩东², 孟晓静²教授

(1 西安建筑科技大学 绿色建筑全国重点实验室, 陕西 西安 710055; 2 西安建筑科技大学 资源工程学院, 陕西 西安 710055; 3 西安建筑科技大学 建筑设备科学与工程学院, 陕西 西安 710055)

中图分类号: X962

文献标志码: A

DOI: 10.16265/j.cnki.issn1003-3033.2024.10.0125

基金项目: 国家自然科学基金面上项目资助(52178089); 榆林市科技计划产学研合作项目(CXY-2021-139)。

【摘要】 为明确厂房内污染气体的分布特征, 高效控制工业建筑环境, 研究分析多种气态污染物与单一气态污染物分布特征间的区别及简化条件, 明确同源同时散发的多组分混合气体的运输特性, 揭示全尺度中多组分混合气体传质简化的可行性范围及需遵循的原则, 并通过数值模拟验证结论的有效性。结果表明: 多组分气体传质简化模型的适用范围为: 同源散发的混合气体在无相变和化学反应时, 其流动参数雷诺数 Re 量级在 10^3 以上, 且马赫数 $Ma < 0.3$ 时, 物性参数在克努森数 $Kn < 0.01$ 且温度在 0.3 倍的振动特征温度 θ_v 和沸腾温度 T' 之间, 可简化组分进行污染物分布特征研究; 简化偏差源于简化前后单位质量混合气体体积力之差 (ΔF), 简化时需保障 ΔF 与主要驱动力之比小于 0.01 ; 理论模型的适用范围及简化原则与模拟结果相符, 证明在适用范围内满足简化原则的条件下, 可以将多种气态污染物简化为单一种类探究污染物分布特征。

【关键词】 气态污染物; 多组分气体; 传质简化模型; 简化原则; 数值模拟

Theoretical analysis and numerical verification of simplified mass transport model for multi-component gas

CAO Yingxue^{1,2}, WANG Jinxiao², WANG Yi^{**1,3}, HUANG Yanqiu^{1,3},
LI Haodong², MENG Xiaojing²

(1 State Key Laboratory of Green Building, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an Shaanxi 710055, China; 2 School of Resource Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an Shaanxi 710055, China; 3 School of Building Services Science and Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an Shaanxi 710055, China)

Abstract: In order to explicit the distribution characteristics of polluted gases in factory buildings and realize efficient control of industrial building environments, the study analyzed the differences and simplification conditions between the distribution characteristics of multiple gaseous pollutants and single gaseous pollutants, clarified the transportation characteristics of multi-component mixed gases emitted

* 文章编号: 1003-3033(2024)10-0124-10; 收稿日期: 2024-06-16; 修稿日期: 2024-08-19

** 通信作者: 王怡(1970—), 女, 山东龙口人, 博士, 教授, 主要从事工业建筑环境方面的研究。E-mail: wangyi@xauat.edu.cn。

simultaneously from the same source, revealed the feasibility range and principles to be followed for mass transfer simplification of multi-component mixed gases in full scale, and verified the validity of the conclusion through numerical simulation. The results show that the applicable range of the multi-component gas mass transfer simplification model is as follows: when the mixed gas emitted from the same source has no phase change and chemical reaction, and its flow parameter Reynolds number Re is above 10^3 and Mach number $Ma < 0.3$, and the physical property parameters are within the range of Knudsen number $Kn < 0.01$ and temperature between 0.3 Characteristic vibrational temperature θ_v and T' , the components can be simplified for studying the distribution characteristics of pollutants. The simplified deviation stems from the difference in volume force per unit mass of the mixed gas before and after simplification (ΔF). When simplifying, it is necessary to ensure that the ratio of ΔF to the main driving force is less than 0.01 . The theoretical model's application range and simplification principle agree with the simulation results. It is proved that a variety of gaseous pollutants can be simplified into a single type under the condition that the simplification principle is met within the applicable scope to explore the distribution characteristics of pollutants.

Keywords: gaseous pollutants; multi-component gas; mass transfer simplification model; simplification principle; numerical simulation

0 引言

工业活动所产生的污染气体通常具有复杂多样的特性,气态污染物组分不同,其物化性质不同,职业接触限值也存在差异,如电解铝工艺中产生的电解烟气含有氟化物、二氧化硫、粉尘等污染物^[1],其中的氟化氢属于剧毒气体,短期暴露于高浓度的氟化氢,可引起眼、鼻、喉部的刺激和疼痛。长期暴露于低浓度的氟化氢,则可能引起慢性呼吸道疾病、骨骼病变、牙齿损害等^[2]。据我国卫生健康委员会统计,2022年,全国共报告各类职业病新病例 11 108 例^[3]。因此,有效控制多组分污染气体,践行职业健康保护行动,对维护全体劳动者身体健康至关重要^[4]。

目前针对多组分气体传质的研究,主要集中在低速、低压、高温高速条件下的多组分气体各组分传输特征上。在低速方面,肖峻锋等^[5]探究了高含硫天然气发生泄漏,研究结果表明:CH₄与H₂S的含量比和管道压力与天然气爆炸危险性呈正相关,而风速为负相关,当CH₄和H₂S体积分数含量比为19、管道压力为7.5 kPa、通风速率为5 m/s时,结果安全性最高;王浩等^[6]探究了混合物模型和组分传输模型在低速通风管道中多组分气体混合条件下模拟结果的差异及其原因,结果表明:在多组分气体混合过程中必须考虑质量传递的作用,组分传输模型计算中将其包含,更适合多组分传输问题,而混合物模型模拟低速通风管道内的浓度扩散过程,会低估

污染气体的扩散程度。在低压方面,张春燕等^[7]数值模拟了H₂-Air混合物燃烧过程,再现了不同初始压力下火焰传播过程及流场扰动状况,发现当H₂体积分数一定时,最大爆炸压力和最大压力上升速率随初始压力降低而线性降低;RUBTSOV等^[8]探究了低压下甲烷-空气混合气体燃烧前缘与圆柱形障碍物的相互作用,试验观察到,在298 K和 $1.33 \times 10^4 \sim 3.99 \times 10^4$ Pa条件下,充分稀释的甲烷-氧气混合物在火焰传播时,火焰前缘在直径为30~50 mm的圆柱状障碍物后面不会形成冯·卡门涡脱落,在相同条件下热产物的流动存在不稳定性。在高温高速方面,QI Chang等^[9]研究了乙烯/丙烷混合物的可燃性上限(Upper Flammable Limit, UFL),结果表明:乙烯和丙烷的UFL与温度呈正相关,与压力呈负相关,随着混合燃料中乙烯比例的增加,压力增加对混合燃料UFL的影响变得不那么明显;HAUNG Cunkui等^[10]测量了沥青饱和砂中溶剂在高温/高压条件下的有效扩散系数,发现正己烷在沥青饱和砂中的有效扩散系数与正己烷和沥青混合物黏度的关系可以表示为幂律关系。当前对于多组分气体传质的研究存在两级分化的现象,具有初始动量通量或浮力通量的通风条件,即中温中速条件下,多组分气体各组分传输特征的研究还不够充分,对于该条件下,是否可以将实际中的多种气态污染物形成的流场特征,简化为以单一组分污染物为代表的流动进行研究,尚无明确结论。

鉴于此,笔者拟分析工业建筑内部多种气态污

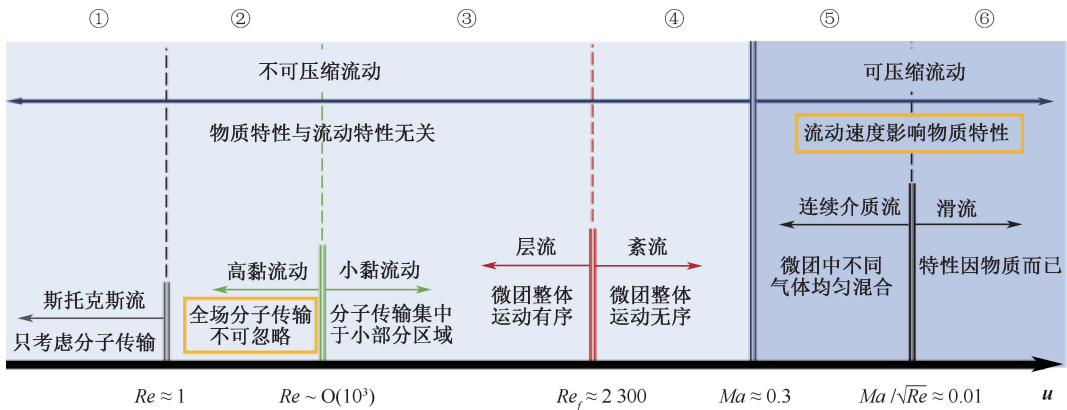
染物与单一气态污染物分布特征间的区别及简化条件,明确同源同时散发的多组分混合气体的运输特性,揭示全尺度中多组分混合气体传质简化的可行性范围及需遵循的原则,并通过数值模拟验证结论的有效性,以期简化此类现象为边界条件的研究提供一定的依据。

1 传质简化模型理论分析

1.1 传质简化可行性范围

流动特性中可行性范围的界定如图 1 所示。随

着宏观速度的增加,流动从阶段①中主要由分子传输驱动,过渡到阶段②分子传输和对流传输共同作用,然后是阶段③、④,对流传输成主导,最后是阶段⑤、⑥,对流传输对物质特性产生影响,影响程度因不同物质而异^[11-12]。对多组分混合气体而言,阶段①、②、⑤、⑥中的流动需要考虑组元间物质特性差异,不能简化多组分混合气体的物质种类及其份额;阶段③、④中,可忽略分子传输和不同组元之间的物质特性差异,简化多组分传质过程中的物质种类及份额。



注: Re 为雷诺数; Ma 为马赫数; $Re \sim O(10^3)$ 代表雷诺数数量级在 10^3 以上; Re_f 为管流雷诺数; u 为流动速度。

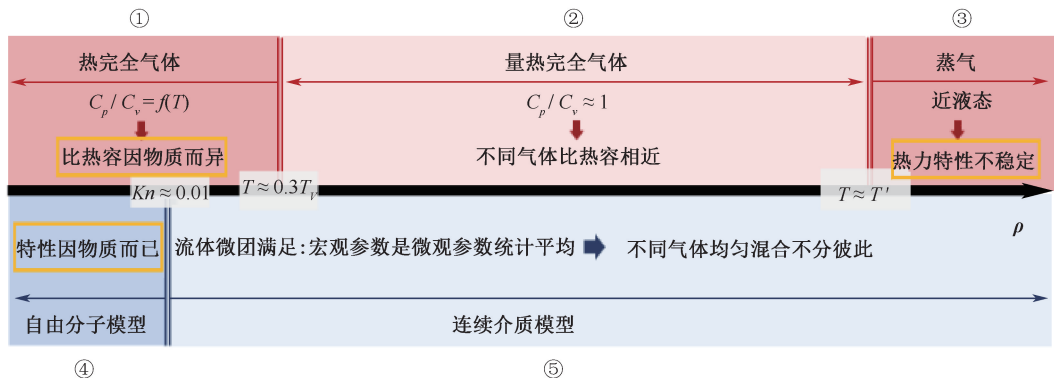
图 1 流动特性中可行性范围的界定

Fig. 1 Definition of suitable range in flow characteristics

因此,在阶段③、④($Re \sim O(10^3)$ 以上且 $Ma < 0.3$) 的流动过程中,对于同时释放的同源多组分混合气体来说,不同组元气体的摩尔分数分布是相同的。在确保流体流动状态不受影响的前提下,可简化多组分混合气体的物质种类,以简化研究问题的边界条件的复杂度^[13]。

由于物质特性在热力学中常用 $p-T-v$ (压力-温

度-体积)图表示,而单位物质密度 ρ 和体积 v 可相互转换,所以将复杂的三维 $p-T-v$ 图简化为 2 部分:上半部分的 $T-\rho$ 图和下半部分的 $p-\rho$ 图。按密度轴整理物质传输特性的相关参数,物质特性中可行性范围的界定如图 2 所示。模型①—③的密度随着温度的降低而增加;模型④—⑤的密度随着压力的升高而增加。



注: C_p 为定压比热容; C_v 为定容比热容; Kn 为克努森数; T_v 为气体的振动特征温度, K ; T_b 为沸腾温度, K 。

图 2 物质特性中可行性范围的界定

Fig. 2 Definition of feasible range in material properties

图 2 中,随着宏观温度降低,物质从模型①(物质决定比热容)阶段,过渡到模型②(不同气体比热容相近)阶段,最后进入模型③(物质热力特性不稳定)阶段。物质的相态会随微小的压力或温度差异而改变。即在多组分混合气体中,模型①和③的情况需要考虑不同组元之间的物质特性差异,不能简化多组分混合气体的物质种类和份额,否则会导致较大的偏差;而在模型②的情况下,物质具有相似的比热容,即受热膨胀程度相近,因此,简化多组分传质过程中的物质组成,无需考虑不同组元之间的物质特性差异。随宏观压力升高,物质从模型④阶段逐渐过渡到模型⑤阶段。在模型④阶段,分子之间的距离非常大,可以忽略分子之间的碰撞,仅考虑分子与壁面的碰撞,不同物质间差异非常明显。而在模型⑤阶段,可使用宏观参数平均值来描述流体微团的特性^[14]。其中,模型⑤热力特性与模型③相近。即对于多组分混合气体,需要考虑模型④中不同组元之间的物质特性差异,不能简化传质过程中多组分混合气体的物质种类和份额,否则会产生显著差异。而在模型⑤中,可忽略不同组元之间的物质特性差异,简化多组分传质可行。此外,在高温或低压的情况下,分子传质中的热致扩散效应和压致扩散效应在常温和常压下并不明显,亦将凸显出来。热致扩散效应和压致扩散效应常在医药和污水处理行业有所应用^[15-16]。

因此,综合考虑密度因素时,对于同源项同时释放的多组分混合气体而言,在模型②和模型⑤($Kn < 0.01$ 且 $T' < T < 0.3T_v$)中的物质,其混合气体宏观物质特性由各组元的参数统计平均得到,且不同种类的气体比热容相近。因此,在保证不改变流体本身的流动状态的前提下,可简化传质过程中多组分混合气体物质种类,进而达到简化研究问题边界条件复杂程度的目的。

综上,可得到简化多组分混合气体传质过程的可行性范围,如图 3 所示。

由图 3 可知:对于同一源项同时释放的多组分混合气体而言,没有相变和化学反应时,如果其流动参数在雷诺数 $Re \sim O(10^3)$ 以上且马赫数 $Ma < 0.3$ 的范围内,物性参数在克努森数 $Kn < 0.01$ 和 $T' < T < 0.3T_v$ 的范围内,各种气体的比热容相近,且仅考虑流体微团的整体运动而忽略分子传输,微团中的各组元摩尔分数同源相似^[13]。即在中温中压中速区,在保证不改变流体本身的流动状态的前提下,可简化多组分混合气体传质过程中的物质种类。总

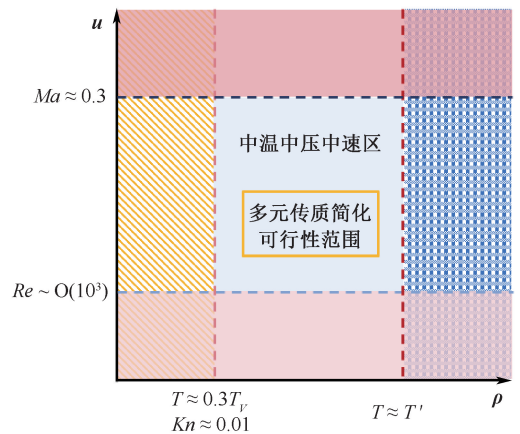


图 3 多组分传质简化的可行性范围

Fig. 3 Feasible range of multi-component mass transfer simplification

之,多组分传质简化的 3 个限制条件为:

- 1) 多组分传质的流动参数在雷诺数 $Re \sim O(10^3)$ 以上且马赫数 $Ma < 0.3$ 范围内。
- 2) 多组分传质的物性参数在克努森数 $Kn < 0.01$ 和 $T' < T < 0.3T_v$ 的范围内。
- 3) 简化时不改变流体本身的流动状态。

上述条件即为多组分传质简化模型的适用范围。另外,上述条件与流动模式无关。即无论其在厂房内部呈现怎样的流动模式,只要污染物的流动符合上述条件,多组分传质问题均可简化为二组元传质。

1.2 传质简化前后的区别

由于多组分传质在简化前后混合气体的密度不同^[17],不同的流体密度会引起流动在体积力上的差异^[18-19],单位质量混合气体的差异记作 ΔF ,当 ΔF 过大时,流体的受力状态就会和实际情况有所出入,则可能进一步导致无法保证简化后的流动状态与原状态相同。

简化前实际工况为 n 组元的混合气体,摩尔质量为 M_m ,初始条件下,环境温度为 T_0 ,混合气体的温度为 $T_0 + \Delta T$,摩尔质量为 M_i 的 i 组元的摩尔分数是 x_i ,摩尔质量为 M 的空气摩尔分数是 x ,则有:

$$\sum_{i=1}^n x_i + x = 1 \quad (1)$$

$$\sum_{i=1}^n x_i M_i + x M = M_m \quad (2)$$

简化后为空气与单一种类污染物所组成的二组元混合气体,选取摩尔质量为 M_1 的第 1 组元气体作为代表性污染物,其摩尔分数为 x_1' ,空气的摩尔分数为 x' ,则二组元混合气体的摩尔质量为 M_b ,原

混合气体中的第 2 到第 n 组元气体称为被简化组元,则有:

$$x'_1 + x' = 1 \quad (3)$$

$$x'_1 M_1 + x' M = M_b \quad (4)$$

在研究过程中,要保证简化前后污染物 M_1 的质量流量 G 与 G' 相同^[13],即:

$$y_1 \cdot \rho_m \cdot A \cdot u \cdot g = y'_1 \cdot \rho_b \cdot A' \cdot u' \cdot g' \quad (5)$$

式中: y_1 和 y'_1 分别为污染物 M_1 简化前后的质量分数; ρ_m 和 ρ_b 分别为多组分混合气体和二元混合气体的密度, kg/m^3 ; A 和 A' 为释放源的面积, m^2 ; u 和 u' 为释放速度, m/s ; g 和 g' 为重力加速度, m/s^2 。简化前后并不改变其他参数,以及质量分数与摩尔分数之间的转换关系:

$$y_i = \frac{x_i M_i}{M_m} \quad (6)$$

与量热完全气体状态方程:

$$p M_m = \rho_m R (T_0 + \Delta T) \quad (7)$$

联立式(5)一式(7)可得:

$$x_1 = x'_1 \quad (8)$$

由式(3)、式(4)、式(8)可得:

$$x_1 M_1 + (1 - x_1) M = M_b \quad (9)$$

因此,借鉴附加浓度浮力的定义^[17]及浮力的计算方法^[20],代入式(1)、式(2)、式(7)和式(9),经计算可得 ΔF 的计算式为:

$$\begin{aligned} \Delta F &= \frac{T_0 + \Delta T}{T_0} M g \left(\frac{1}{M_b} - \frac{1}{M_m} \right) \\ &= g \frac{T_0 + \Delta T}{T_0} \frac{M \Delta M_1}{M_m M_b} \end{aligned} \quad (10)$$

式中 ΔM_1 为简化前后混合气体摩尔质量差。

$$\Delta M_1 = M_m - M_b = \sum_{i=2}^n x_i (M_i - M) \quad (11)$$

从式(11)可以看出,去除这个问题中的不变量—— g 、 T_0 和 M , ΔF 的影响因素主要有 3 项:

1) ΔT 。混合气体与环境空气的温度差值,总体上 ΔT 项与 ΔF 呈正相关的趋势。

2) $M_m M_b$ 。简化前后的混合气体的摩尔质量 $M_m M_b$ 项与 ΔF 呈负相关的趋势。

3) ΔM_1 。由式(11)可知: ΔM_1 项为复合参数。 ΔM_1 项表征被简化组分与空气的质量离散程度。

ΔM_1 项可能等于 0,进而导致 ΔF 等于 0: $\sum_{i=2}^n x_i \rightarrow 0$

则 $\Delta M_1 \rightarrow 0$,当被简化组元的摩尔分数均很小,也就是被简化组元在多组分混合气体中所占比例很小时, ΔM_1 项也将趋于 0。

$\sum_{i=2}^n (M_i - M) \rightarrow 0$ 则 $\Delta M_1 \rightarrow 0$,当被简化组元的

摩尔质量与空气的摩尔质量差值均很小,也就是被简化组元与空气的摩尔质量非常接近时, ΔM_1 项将趋于 0。

$\sum_{i=2}^n x_i (M_i - M) \rightarrow 0$ 则 $\Delta M_1 \rightarrow 0$,当被简化组元

与空气的加权摩尔质量差之和很小, ΔM_1 项将趋于 0。因此,也就得出 ΔM_1 项趋于 0 条件下 3 个对应的代表性组元选取方法:

$$\max \{x_i\}, i = 1, 2, \dots, n \quad (12)$$

$$\max \{|M_i - M|\}, i = 1, 2, \dots, n \quad (13)$$

$$\max \{|x_i (M_i - M)|\}, i = 1, 2, \dots, n \quad (14)$$

在上述 3 个条件中,选取一个使得 ΔM_1 项最小,这样确定的代表性组元,则尽可能减小多组分传质简化所引起的偏差 ΔF 。

1.3 传质简化的原则

经分析,当多组分传质简化偏差 ΔF 过大时,流体的受力状态会与实际情况不同,从而导致简化后的流动状态与原状态不同。从流体受力平衡来确定简化原则,在多组分简化的可行性范围内,可忽略属于分子传输的黏性项和压力项中的表面力部分,在流动过程中的主要受力为惯性力项和体积力项。当单位质量混合气体的 ΔF 远小于其受到的惯性力或体积力时,则可以忽略偏差,保证简化后和简化前的多组分传质流动状态相同。因此,分别讨论当主要受力是惯性力项或体积力项时,多组分传质在简化可行性范围内需要保障的原则如下:

1) 惯性力项为流动主要动力。已知单位质量的多组分混合气体受到的惯性力 F_{i-m} 的计算式为^[20-21]:

$$F_{i-m} = l^2 u^2 \quad (15)$$

令 R_1 为 ΔF 与惯性力通量之比,即

$$R_1 = \frac{\Delta F}{F_{i-m}} \quad (16)$$

将式(10)和式(15)代入式(16),整理可得:

$$\begin{aligned} R_1 &= \frac{g}{l^2 u^2} \frac{T_0 + \Delta T}{T_0} \left(\frac{M}{M_m} - \frac{M}{M_b} \right) \\ &= \frac{g}{l^2 u^2} \frac{T_0 + \Delta T}{T_0} \frac{M \Delta M_1}{M_m M_b} \end{aligned} \quad (17)$$

其中,

$$\Delta M_1 = M_m - M_b = \sum_{i=2}^n x_i (M_i - M) \quad (18)$$

表征简化前后混合气体摩尔质量差,则:

① 当 $R_1 = \frac{\Delta F}{F_{i-m}} \ll 1$ 时,则说明多组分混合气体的惯性力通量远远大于 ΔF ,可忽略多组分传质简化偏差。

② 当 $R_1 = \frac{\Delta F}{F_{i-m}} \approx 1$ 时,则说明多组分混合气体的惯性力通量与 ΔF 的量级相当,不可忽略多组分传质简化偏差,否则流动状态将与实际工况不符。

③ 当 $R_1 = \frac{\Delta F}{F_{i-m}} \gg 1$ 时,则说明多组分混合气体的惯性力通量远远小于 ΔF ,此时选用的二组分传质模型并不合适,需重新选择代表性组元,或保持原来的多组分模型。

2) 体积力项为流动主要动力。已知单位质量的多组分混合气体受到的浮力 F_m 的计算式为^[20]:

$$F_m = - \left(\frac{\rho_{m, T_0 + \Delta T} - \rho_{T_0 + \Delta T}}{\rho_{m, T_0 + \Delta T}} \right) g \quad (19)$$

令 R_2 为 ΔF 与浮力通量之比,即:

$$R_2 = \frac{\Delta F}{F_m} \quad (20)$$

将式(10)和式(19)代入式(20),整理可得:

$$\begin{aligned} R_2 &= \frac{(T_0 + \Delta T)M(M_m - M_b)}{[(T_0 + \Delta T)M - T_0 M_m]M_b} \\ &= \frac{(T_0 + \Delta T)M\Delta M_1}{(\Delta TM + T_0\Delta M_2)M_b} \end{aligned} \quad (21)$$

其中,

$$\Delta M_2 = M_m - M = \sum_{i=1}^n x_i(M_i - M) \quad (22)$$

ΔM_2 表征多组分混合气体中所有组元的摩尔质量以空气的摩尔质量为中心的一阶中心距,则:

① 当 $R_2 = \frac{\Delta F}{F_m} \ll 1$ 时,则说明多组分混合气体的浮力通量远远大于 ΔF ,可忽略多组分传质简化偏差。

② 当 $R_2 = \frac{\Delta F}{F_m} \approx 1$ 时,说明多组分混合气体的浮力通量与 ΔF 的量级相当,不可忽略多组分传质简化偏差,否则流动状态将与实际工况不符。

③ 当 $R_2 = \frac{\Delta F}{F_m} \gg 1$ 时,则说明多组分混合气体的浮力通量远远小于 ΔF ,此时选用的二组分传质模型并不合适,需重新选择代表性组元,或保持原来的多组分模型。

综上,多组分传质简化的 3 个限制条件为:

1) 多组分传质流动参数在雷诺数 $Re \sim O(10^3)$ 以上且马赫数 $Ma < 0.3$ 的范围内。

2) 多组分传质物性参数在克努森数 $Kn < 0.01$ 且 $T^* < T < 0.3\theta_v$ 的范围内。

3) 简化前后的特性参数满足: ΔF 与惯性力之比 $R_1 < 0.01$ 或 ΔF 与体积力之比 $R_2 < 0.01$ 。

2 传质简化模型数值验证

2.1 几何模型及网格划分

利用 CFD 方法建立受限空间内气体散发的数学模型,采用数值模拟的方法验证上述理论,简化厂房几何模型,计算模型如图 4 所示。

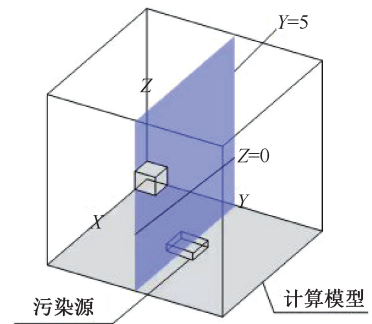


图 4 计算模型

Fig. 4 Numerical simulation model

房间尺寸为 10 m(长)×10 m(宽)×10 m(高),污染源尺寸为 2 m(长)×2 m(宽)×0.5 m(高),污染源上方射流,具有初始速度以及初始温度。定义污染源中心的坐标为(5,5,0)。由于模型及流场均具有对称性,故选取 $Y=5$ 处 XZ 平面建立二维模型进行数值模拟。

自由平面射流的计算域为 10 m×10 m,源项出口宽度为 2 m,高 0.5 m。网格性能影响数值模拟结果经网格无关性验证后综合考虑模拟精度与计算效率,设置网格尺寸为 0.2 m,网格分布稳定,质量良好。

2.2 边界条件及参数设定

模型污染源上表面定为速度入口边界条件。左右边界均设为压力出口边界,温度为环境温度。设置上下边界为绝热边界条件。湍流强度在速度和压力边界上均设置为 5%。

模拟采用二维稳态模拟,采用组分输运模型模拟扩散过程,压力-速度耦合采用 SIMPLE 迭代算法,湍流模型选 Standard k- ϵ 模型^[17],其中,组分影响将采用不会发生化学反应的物质运移的模型。控制方程的数值模拟解法采用有限容积法、湍流方程与动量方程均采用二阶迎风格式。

2.3 数值模拟方法的有效性验证

为验证数值模拟方法的有效性,对比前期试验,建立与模型试验一致的数值模拟物理模型进行模拟,并比较试验结果与模拟结果,试验模型参数及工况设置见参考文献^[22]。试验数据与模拟数据对比如图5所示。由图5可知:模拟数据与试验数据趋势相同,验证了数值模拟方法的有效性。

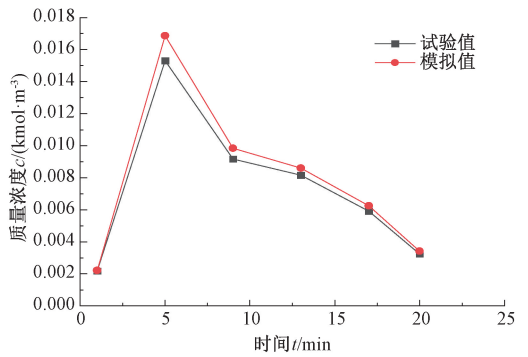


图5 测点浓度试验值与模拟值对比
Fig.5 Comparison of experimental and simulated values of measured point concentrations

2.4 数值工况设置

为验证多组分传质简化原则,分别设计以惯性和体积力为主导的多组工况。为满足不同数量级下的 R_1 、 R_2 ,2组工况混合气体选取成分不同。具体工况见表1。

表1 数值模拟工况

Table 1 Numerical simulation working conditions

| 序号 | 气体组分/% | | | 温度/K | 初速度/(m·s ⁻¹) | R_1 | R_2 |
|----|---------------------|---------------------|-------|------|--------------------------|----------|----------|
| 1 | HF:50 | CO ₂ :5 | He:5 | 300 | 10 | 0.000 6 | 0.118 |
| 2 | HF:5 | CO ₂ :20 | He:2 | 300 | 5 | 0.002 19 | 0.313 |
| 3 | HF:55 | CO ₂ :35 | He:5 | 800 | 1 | 1.12 | 0.26 |
| 4 | HF:5 | CO ₂ :40 | He:50 | 800 | 0.1 | 290 | 0.47 |
| 5 | SO ₂ :20 | CO ₂ :5 | He:70 | 800 | 0.5 | 643 | 0.897 |
| 6 | HF:1 | CO ₂ :1 | He:95 | 300 | 0.5 | 0.612 | 0.093 |
| 7 | SO ₂ :80 | CO ₂ :5 | He:5 | 800 | 0.5 | 0.117 8 | 0.008 94 |
| 8 | SO ₂ :20 | CO ₂ :30 | He:45 | 800 | 0.5 | 16.79 | 1.031 |
| 9 | SO ₂ :20 | CO ₂ :30 | He:45 | 300 | 0.5 | 6.295 | 75.15 |
| 10 | SO ₂ :25 | CO ₂ :22 | He:48 | 300 | 0.5 | 6.934 | 411.12 |

2.5 模拟结果分析

各工况经数值模拟得到的代表组元质量分数云图如图6所示,图中标注为部分工况简化前后在空间的显著扩散范围,每组工况中左侧小图为多组分

混合条件,右侧为简化后的双组元条件。部分工况在不同水平高度上简化前后代表组元质量分数对比点线图如图7所示。

工况1、2中, $R_1 \ll 1$,惯性力为主要动力项,气

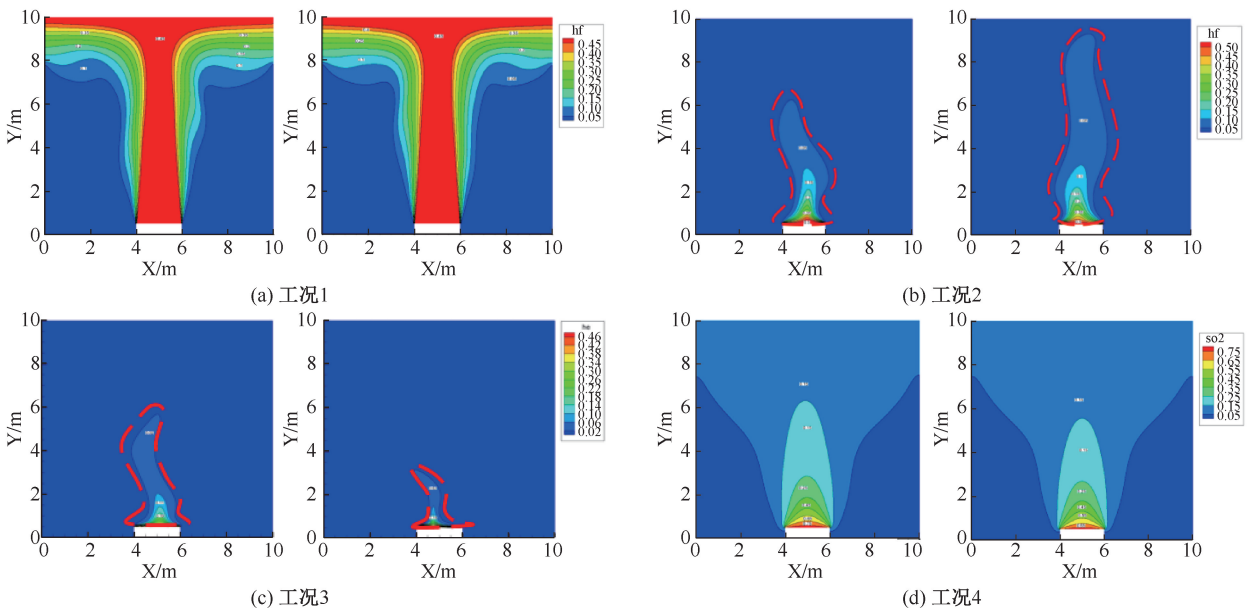


图6 部分工况简化前后代表组元质量分数云图

Fig.6 Some conditions before and after simplification represent component mass fraction cloud image

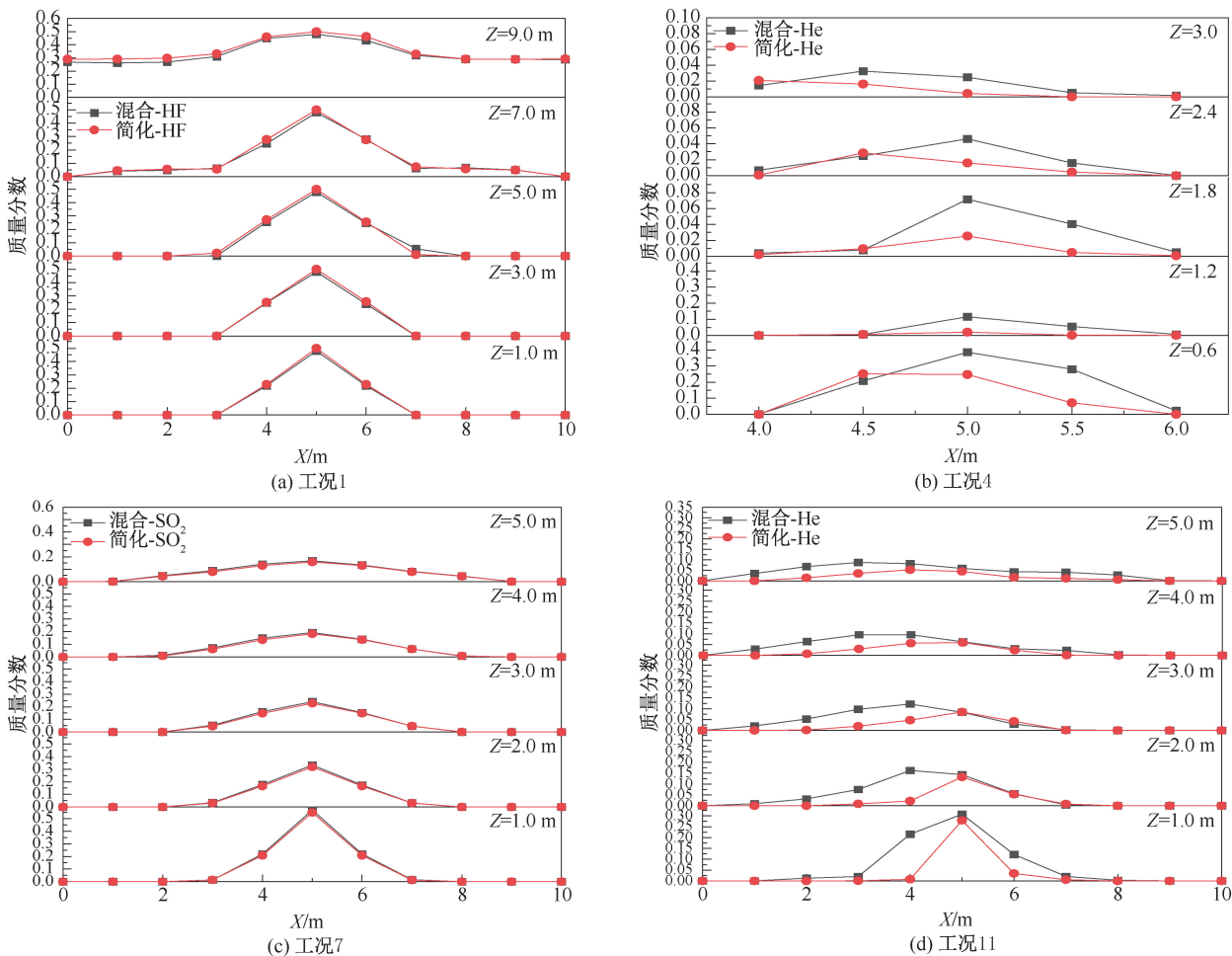


图 7 部分工况简化前后代表组元质量分数对比点线图

Fig. 7 Gas mass fraction comparison point diagram

体初速度较大,气体上升到顶部高度出向 2 边流动逸散,形成 T 字形。简化前后质量分布云图基本一致,符合简化原则。工况 3、4、5 中, $R_1 \geq 1$, 不符合简化传质条件。从图 6 可以看出,简化前后在空间的扩散情况并不相同,存在较大差异。

图 7a 为工况 1 简化前后不同水平高度上代表性组元氟化氢(HF)质量分数散点图,从图 7a 可以看出,简化前后在不同高度 HF 的质量分数点线图基本重合,意味着简化前后 HF 在空间中的分布情况一致,简化组元所产生的误差可以忽略不计,模拟结果符合气态污染物传质简化理论。工况 4 中, $R_1 \gg 1$, 理论上存在较大误差,在图 7b 中不仅是简化前后相同位置代表性组元(He)质量分数存在差异,而且在空间上分布情况也存在差异,此时简化模型已不再适用。

工况 6、7 中, $R_2 < 1$, 此时体积力为主导作用,混合气体在空间内自由扩散。简化前后气体在空间中的分布相似,无较大差异,符合简化多组分传质简

化理论。工况 8 中, $R_2 \approx 1$, 其气体分布云图存在一定差异,但仍有相似性。工况 9、10 中, $R_2 \gg 1$, 理论上不符合传质简化条件。从图 7b 可以看出,简化前后气体分布差异较大,不具有相似性。

图 7c 为工况 7 简化前后不同水平高度上代表性组元(SO₂)质量分数散点图,从图 7c 可以看出,简化前后在不同高度 SO₂ 的质量分数点线图基本重合,表明简化前后 SO₂ 在空间中的分布情况一致,简化组元所产生的误差可以忽略,模拟结果符合气态污染物传质简化理论。图 7d 为工况 11 的气体质量分数散点图,简化前后同一点的质量分数存在一定差值,简化前后两者在空间中的分布情况具有较大差异,此时传质简化模型已不再适用。数值模拟结果符合简化传质理论。

3 结 论

1) 多组分传质简化的可行性范围为:对于同一源项释放的多组分混合气体,没有相变和化学反应

时,如果其流动参数在 Re 数量级在 10^3 以上且 Ma 小于 0.3 的范围内,物性参数在 Kn 小于 0.01 且温度在沸腾温度和 0.3 的振动特征温度之间时,各种气体的比热容相近,且仅考虑流体微团的整体运动而忽略分子传输。这个范围即为多组分传质简化模型的适用范围,范围内微团中的各组分的摩尔分数同源自相似,可考虑在不改变流体本身的流动状态的前提下,简化多组分混合气体传质过程中的物质种类。

2) 多组分传质简化偏差的影响因素包括混合气体与环境空气的温度差值、简化前后的混合气体的摩尔质量乘积和简化前后混合气体摩尔质量差。通过改变这几项的大小,确定代表性组元,则可尽可能减小多组分传质简化所引起的偏差。

能减小多组分传质简化所引起的偏差。

3) 在可行性范围内,多组分传质简化需保障的基本原则是:简化前后的特性参数满足:当流动主要受力为惯性力时,多组分传质简化偏差与惯性力之比 $R_1 < 0.01$;当流动主要受力为体积力时,多组分传质简化偏差与体积力之比 $R_2 < 0.01$ 。

4) 模拟验证结果表明:工况 $R_1 < 0.01$ 或 $R_2 < 0.01$ 时,简化前后组元质量分布情况基本一致,而其他情况下简化前后组元质量分布存在一定误差,证明在适用范围内满足简化原则的条件下,可以将多种气态污染物简化为单一类型探究污染物分布特征。

参 考 文 献

- [1] 厉衡隆, 顾松青. 铝冶炼生产技术手册[M]. 北京: 冶金工业出版社, 2011: 183-205.
- [2] GBZ 2.1—2007, 工作场所所有害因素职业接触限值第1部分: 化学有害因素[S].
GBZ 2.1—2007, Occupational exposure limits for hazardous agents in the workplace: part 1: chemical hazardous agents [S].
- [3] 中华人民共和国国家卫生健康委员会. 2022 年我国卫生健康事业发展统计公报[EB/OL]. (2023-10-12).
<http://www.nhc.gov.cn/>.
- [4] 中共中央, 国务院. 健康中国行动(2019—2030 年)[EB/OL]. (2019-07-15). https://www.gov.cn/xinwen/2019-07/15/content_5409694.htm.
- [5] 肖峻峰, 陈健, 戴程呈, 等. 高含硫天然气泄漏爆炸与毒性影响因素分析[J]. 中国安全科学学报, 2020, 30(6): 43-49.
XIAO Junfeng, CHEN Jian, DAI Chengcheng, et al. Influencing factors on explosion and toxicity of high-sulfur natural gas[J]. China Safety Science Journal, 2020, 30(6): 43-49.
- [6] 王浩, 亢燕铭, 钟珂, 等. Mixture 和 Species 模型模拟低速通风管道内气体混合时的差异分析[J]. 东华大学学报: 自然科学版, 2022, 48(2): 100-104.
WANG Hao, KANG Yanming, ZHONG Ke, et al. Analysis of difference between Mixture and Species models in simulating gas mixing in low-speed ventilation ducts [J]. Journal of Donghua University: Natural Science, 2022, 48(2): 100-104.
- [7] 张春燕, 陶刚, 涂善东, 等. 低压氢气-空气混合物爆炸试验研究及数值模拟[J]. 中国安全科学学报, 2018, 28(2): 87-92.
ZHANG Chunyan, TAO Gang, TU Shandong, et al. Experimental study and numerical simulation of flow-pressure hydrogen-air mixture explosion[J]. China Safety Science Journal, 2018, 28(2): 87-92.
- [8] RUBTSOV N M, CHERNYSH V I, TSVETKOV G I, et al. Interaction of the combustion front of methane-air mixture at low pressures with obstacles of cylindrical shape[J]. Fire Phys Chem, 2021, 1(3): 174-178.
- [9] QI Chang, WANG Yalei, NING Ye, et al. Investigation of the upper flammability limit of ethylene/propane mixtures in air at high temperatures and pressures[J]. Energy, 2023, 109: DOI:10.1016/j.joei.2023.101291.
- [10] HUANG Cunkui, HAWRELECHKO C, DONALD J, et al. Experimental study of diffusivity of hexane in bitumen-saturated porous media under high temperature/pressure conditions[J]. AIChE Journal, 2020, 66(8): DOI:10.1002/aic.16265.
- [11] 威尔特[美], 威克斯[美], 威尔逊[美], 等. 动量、热量和质量传递原理[M]. 马紫峰, 吴卫生, 译. 北京: 化学工业出版社, 2005: 211-219.
WELTY J R, WICKS C E, WILSON R E. Fundamentals of momentum, heat, and mass transfer [M]. MA Zifeng, WU

Weisheng, Translated. Beijing: Chemical Industry Press, 2005: 211–219.

- [12] BIRD R B, STEWART W E, LIGHTFOOT E N. Transport phenomena[M]. New York: John Wiley & Sons, Inc, 2002: 34–37.
- [13] 陈晋南. 传递过程原理[M]. 北京: 化学工业出版社, 2004: 235–278.
- [14] 余常昭. 环境流体力学导论[M]. 北京: 清华大学出版社, 1992: 10–18.
- [15] 西蒙·费德[英], 布鲁斯·杰斐逊[英]. 膜技术与工业废水回用[M]. 蔡邦肖, 译. 北京: 化学工业出版社, 2006: 191–203.
- JUDD S, JEFFERSON B. Membranes for industrial wastewater recovery and re-use [M]. CAI Bangxiao, Translated. Beijing: Chemical Industry Press, 2006: 191–203.
- [16] 小约翰·安德森[美]. 高超声速和高温气体动力学[M]. 杨永, 李栋, 译. 北京: 航空工业出版社, 2013: 126–151.
- ANDERSON J D. Hypersonic and high-temperature gas dynamics [M]. YANG Yong, LI Dong, Translated. Beijing: Aviation Industry Press, 2013: 126–151.
- [17] 王梦影. 双浮升力作用下的混合对流流场特性研究[D]. 西安: 西安建筑科技大学, 2019.
- WANG Mengying. Research on the characteristics of mixed convection flow field under the action of double buoyancy forces [D]. Xi'an: Xi'an University of Architecture and Technology, 2019.
- [18] RAJARATNAM N, BEITAOS S. Plane turbulent impinging jets[J]. Journal of Hydraulic Research, 1973, 11(1): 29–59.
- [19] FERZIGER J H, PERIC M. Computational methods for fluid dynamics: Third, rev. Edition [M]. New York: Springer, 2002: 134–154.
- [20] 普朗特·奥斯瓦提奇[德], 维格哈特[德]. 流体力学概论[M]. 郭永怀, 陆士嘉, 译. 北京: 科学出版社, 2016: 103–128.
- [21] 章梓雄, 董曾南. 粘性流体力学[M]. 北京: 清华大学出版社, 1998: 10–20.
- [22] CAO Yingxue, WANG Yi, ZHOU Yu, et al. Spatio-temporal distribution of gaseous pollutants from multiple sources in industrial buildings with different flow patterns[J]. Building Simulation, 2022, 15(9): 1–16.



作者简介: 曹莹雪 (1988—), 女, 辽宁沈阳人, 博士, 副教授, 主要从事工业建筑环境主-被联合控制技术、工业职业健康评估等方面的研究。E-mail: yxcao1206@xauat.edu.cn。