

文章编号:1672-3961(2008)06-0061-04

双扩散效应对室内 VOCs 对流扩散的影响

耿文广¹, 陈宝明², 田茂诚¹, 刘芳^{1,2}

(1. 山东大学能源与动力工程学院, 山东 济南 250061; 2. 山东建筑大学热能工程学院, 山东 济南 250101)

摘要:消除室内的挥发性有机化合物(volatile organic compounds, VOCs)须掌握其扩散和分布规律,根据不可逆过程热力学基本原理,考虑双扩散效应的影响,建立了三个物理量的梯度驱动下封闭空间内自然对流传热传质的数学模型.并采用数值方法研究了室内环境中同时存在温度梯度、湿度梯度和 VOCs 浓度梯度时的自然对流传热传质现象,着重分析了考虑交叉扩散效应时热瑞利数和浮力比数等对室内 VOCs 对流扩散的影响.在温度梯度和 VOCs 浓度梯度方向相同时,热扩散作用促进了 VOCs 的对流扩散.

关键词:挥发性有机化合物;双扩散效应;传热传质;自然对流;数值研究

中图分类号:TQ021.4; TK124 **文献标志码:**A

Influence of double diffusion effects on the convective diffusion of indoor VOCs

GENG Wen-guang¹, CHEN Bao-ming², TIAN Mao-cheng¹, LIU Fang^{1,2}

(1. School of Energy and Power Engineering, Shandong University, Jinan 250061, China;

2. School of Thermal Energy Engineering, Shandong Jianzhu University, Jinan 250101, China)

Abstract: In order to find the distribution of volatile organic compounds (VOCs) in buildings, based on the principle of thermodynamics of irreversible processes and the double diffusion effects, a mathematical model was developed based on the principle of thermodynamics of irreversible processes and the double-diffusion effects, to effectively analyze the natural convective heat and mass transfer in the presence of three physical (temperature, VOCs and humidity concentration) gradients, and the mathematic model was numerically solved by the FEM method. The solet effect and Dufour effect on the convective diffusion of VOCs in indoor surroundings was specially investigated. The average Sherwood number was graphically presented with various conditions.

Key words: volatile organic compounds; double diffusion effects; heat and mass transfer; natural convection; numerical study

0 引言

建筑材料及家居饰品所释放出大量的 VOCs 对室内空气品质的影响越来越严重.自从上世纪末期开始,部分学者^[1-3]研究了 VOCs 在板材中的散发机理.而关于 VOCs 在室内的扩散机理及其影响因素的研究相对较少. Peder^[4]研究发现室内 VOCs 的扩散不仅和温度有关,还受湿度的影响. M. S. Zu-

raimi^[5]统计发现新加坡比欧洲地区室内 VOCs 的含量较高,分析认为是因为相对湿度较大.可以推断, VOCs 的扩散不仅与其自身的浓度梯度有关,还受温度梯度和湿度梯度的影响.我国南北地区温湿度差异显著,研究温度和湿度梯度对 VOCs 在室内扩散过程的影响,对控制和消除室内有机气体有一定的指导作用.一般来讲,建筑室内同时存在多个物理场,包含温度场、湿度场和 VOCs 浓度场等.而多物理场共存时的传热传质过程又将伴随着热附加扩散

收稿日期:2008-03-07

基金项目:国家自然科学基金资助项目(50646022),山东省自然科学基金资助项目(Y2006F29)

作者简介:耿文广(1977-),男,山东茌平人,博士研究生,主要从事传热传质研究.

E-mail: gwg_2005@mail.sdu.edu.cn

效应(Soret effect)和扩散附加热效应(Dufour effect),并且研究表明耦合扩散效应对传热传质的影响在诸多方面不可忽略^[6,7].新建建筑中地板辐射采暖广泛被采用,地板处温度、湿度和 VOCs 的浓度较大,内墙面附近的温湿度和 VOCs 的浓度较小.以此为背景,笔者建立自然对流传热传质的数学模型,研究在考虑交叉扩散效应时室内 VOCs 的对流扩散规律.

1 数学模型

如图 1 所示,将地板采暖的室内环境简化为二维方形腔体.在 $y=0$ 即底部壁面处保持高温、高湿度和高 VOCs 浓度边界, $y=L$ 即顶部壁面处保持绝热不可渗透,在 $x=0$ 和 $x=L$ 两个竖直壁面处保持低温、低湿度和低 VOCs 浓度边界.初始时刻腔体内充满三元流体,即干空气、水蒸汽和 VOCs 气体.

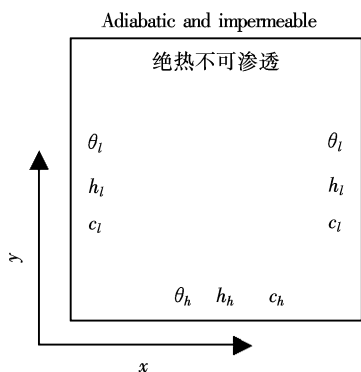


图 1 系统简图

Fig. 1 Schematic of the system

为便于研究,现作出以下基本假设:(1) 封闭腔体内部的流动为二维、层流、稳态;(2) 各组分之间不发生化学反应;(3) 三元体系的密度变化符合 Boussinesq 假设,即

$$\rho(T, c, h) = \rho_0 [1 - \alpha_T(T - T_0) - \alpha_c(c - c_0) - \alpha_h(h - h_0)], \quad (1)$$

其中 α_T 为温度变化引起的体积膨胀系数, α_c 和 α_h 分别为 VOCs 和水蒸汽的浓度变化引起的体积膨胀系数,其定义式分别为

$$\alpha_T = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right); \alpha_c = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial c} \right); \alpha_h = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial h} \right),$$

基于上述假设,考虑交叉扩散效应,方腔中多浮升力层流自然对流的无量纲方程可表示为

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (2)$$

$$\mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} = -\nabla P + Pr \cdot \nabla^2 \mathbf{U} + \mathbf{F}, \quad (3)$$

$$\mathbf{U} \cdot \nabla \theta = \nabla^2 \theta + D_{CT} \nabla^2 C + D_{HT} \nabla^2 H, \quad (4)$$

$$\mathbf{U} \cdot \nabla C = \frac{1}{Le_C} (\nabla^2 C + S_{TC} \nabla^2 \theta + G_{HC} \nabla^2 H), \quad (5)$$

$$\mathbf{U} \cdot \nabla H = \frac{1}{Le_H} (\nabla^2 H + S_{TH} \nabla^2 \theta + G_{CH} \nabla^2 C), \quad (6)$$

$$F_x = 0, F_y = Ra \cdot Pr \cdot (\theta + N_C \cdot C + N_H \cdot H). \quad (7)$$

边界条件如下:

$$\mathbf{U} = 0, \theta = 0, H = 0, C = 0, \text{ at } X = 0 \text{ or } 1;$$

$$\mathbf{U} = 0, \frac{\partial \theta}{\partial Y} = \frac{\partial H}{\partial Y} = \frac{\partial C}{\partial Y} = 0, \text{ at } Y = 1;$$

$$\mathbf{U} = 0, \theta = 1, H = 1, C = 1, \text{ at } Y = 0,$$

式中, \mathbf{U} 为无量纲速度, P 为无量纲压力, θ 、 C 、 H 分别为无量纲温度、污染物浓度和湿度, S_{TC} 和 S_{TH} 为热附加扩散效应准则数, D_{CT} 和 D_{HT} 为扩散附加热效应准则数, G_{CH} 和 G_{HC} 为质附加扩散效应准则数, N_C 和 N_H 为浮力比数, Le_C 和 Le_H 为刘易斯准则数, Ra 表示热瑞利数, Pr 为普朗特数,定义式分别为

$$S_{TC} = \frac{k_{TC} \Delta T}{D_C \Delta c}, S_{TH} = \frac{k_{TH} \Delta T}{D_H \Delta h}, D_{CT} = \frac{k_{CT} \Delta c}{a \Delta T},$$

$$D_{HT} = \frac{k_{HT} \Delta h}{a \Delta T}, G_{CH} = \frac{k_{CH} \Delta c}{D_H \Delta h}, G_{HC} = \frac{k_{HC} \Delta h}{D_C \Delta c},$$

$$N_C = \frac{\alpha_C \Delta c}{\alpha_T \Delta T}, N_H = \frac{\alpha_H \Delta h}{\alpha_T \Delta T}, Le_H = \frac{a}{D_H}, Le_C = \frac{a}{D_C},$$

$$Ra = \frac{gL^3 \alpha_T \Delta T}{\nu a}, Pr = \frac{\nu}{a}, \Delta h = h_2 - h_1, \Delta T = T_2 - T_1,$$

$$\Delta c = c_2 - c_1,$$

其中, k_{TC} 和 k_{TH} 为热扩散系数,单位为 $\text{mol} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$; k_{CT} 和 k_{HT} 为扩散热系数,单位为 $\text{K} \cdot \text{m}^5 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$; k_{CH} 和 k_{HC} 为质附加扩散系数, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$; a 为热扩散率,单位为 $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$; D_C 和 D_H 分别为 VOCs 和水蒸汽的质扩散系数,单位为 $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$; T 为温度, K ; c 和 h 分别为 VOCs 和水蒸汽的浓度,单位为 $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$.

考虑交叉扩散效应的影响,因此表征传热传质的平均努谢尔特数 (\overline{Nu})、VOCs 的平均舍伍德数 (\overline{Sh}_C) 和水蒸汽的平均舍伍德数 (\overline{Sh}_H) 与传统的表达方式有所不同,其定义式分别为:

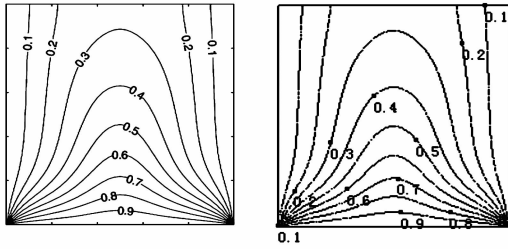
$$\overline{Nu} = \int_0^1 \left[\frac{\partial \theta}{\partial X} \Big|_{X=1} + D_{CT} \frac{\partial C}{\partial X} \Big|_{X=1} + D_{HT} \frac{\partial H}{\partial X} \Big|_{X=1} \right] dY, \quad (8)$$

$$\overline{Sh}_C = \int_0^1 \left[\frac{\partial C}{\partial X} \Big|_{X=1} + S_{TC} \frac{\partial T}{\partial X} \Big|_{X=1} + G_{HC} \frac{\partial H}{\partial X} \Big|_{X=1} \right] dY, \quad (9)$$

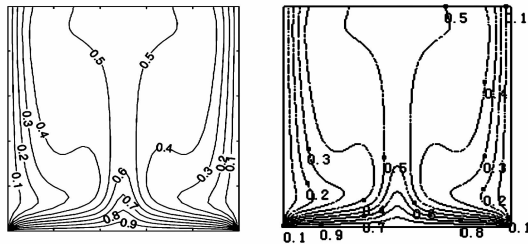
$$\overline{Sh}_H = \int_0^1 \left[\frac{\partial H}{\partial X} \Big|_{X=1} + S_{TH} \frac{\partial T}{\partial X} \Big|_{X=1} + G_{CH} \frac{\partial C}{\partial X} \Big|_{X=1} \right] dY. \quad (10)$$

2 求解方法

基于不可逆过程热力学基本原理^[8],采用 CFD 有限元方法进行数值求解.当网格单元数由 3 562 增至 5 708 时,平均努谢尔特数仅相差 0.014%,为减小计算量,以下结果均按照 3 562 个网格单元进行计算.当上壁面绝热,左右侧为低温边界,下壁面为高温边界条件下与文献[9]解的比较结果详见图 2.



a 文献[9]($Pr = 0.7, Ra = 5000$) b 本文结果($Pr = 0.7, Ra = 5000$)



c 文献[9]($Pr = 0.7, Ra = 10^5$) d 本文结果($Pr = 0.7, Ra = 10^5$)

图 2 本文与文献[9]的温度等值线的比较

Fig.2 Isotherm comparison between the obtained result and that in Reference [9]

由图 2 可见,边界条件相同时,计算结果与文献[9]温度等值线的分布完全一致.由此可见,所建立的数学模型和计算方法可行.

3 计算结果及讨论

在不考虑交叉扩散效应时热瑞利数、浮力比数、刘易斯数等对封闭腔体内的自然对流传热传质的影响规律较为明确.为进一步准确把握室内 VOCs 的分布特征,着重考察了不同交叉扩散效应准则数时热瑞利数、浮力比数等对 VOCs 对流扩散的影响.由交叉扩散效应准则数的表达式知,热扩散效应与扩散热效应之间有着内在联系,在平均温度和平均浓度保持恒定时,热扩散效应准则数和扩散热效应准则数的乘积保持不变,取热扩散效应准则数和扩散热效应准则数的乘积为 $0.06^{[10-11]}$,并假定 $S_{TC} = S_{TH}$, $D_{CT} = D_{HT}$, $G_{HC} = G_{CH}$.

3.1 交叉扩散效应的影响

交叉耦合扩散效应,即温度梯度引起的质量扩

散和浓度梯度引起的热扩散等.图 3 为不同热扩散效应准则数(S_{TC})时污染物浓度场的分布图,其中 $Ra = 10^5$, $Pr = 0.7$,前面已叙述及热扩散效应与扩散热效应的取值是相关联的,三个工况中交叉扩散准则数的取值分别为:(a) $S_{TC} = 0.1, D_{CT} = 0.6$; (b) $S_{TC} = 0.5, D_{CT} = 0.12$; (c) $S_{TC} = 1.0, D_{CT} = 0.06$.

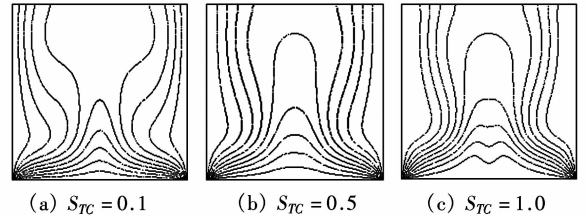


图 3 污染物的浓度场等值线分布
Fig.3 The contour distribution of VOCs

热附加扩散系数 S_{TC} 主要体现温度梯度对污染物浓度场的影响,由图 3 可以看出,在方形腔体底边高温高浓度条件下,随着 S_{TC} 的增加,污染物的浓度场发生明显变化,边壁处的浓度梯度减小,这是因为热扩散作用使得 VOCs 由高温区向低温区扩散^[6].而传统理论认为,浓度梯度减小表征着传质减弱.但存在交叉效应时,应当考虑温度梯度引起的质扩散,即传质量不仅仅由浓度梯度决定.交叉扩散效应的存在是促进还是抑制 VOCs 的传质量?可进一步通过分析传质舍伍德数的变化规律来确定.

3.2 热瑞利数 Ra 对 VOCs 对流扩散的影响

热瑞利数 Ra 体现了流体物性以及温度梯度的影响,综合表现为热浮升力的强度,直接影响腔体内的流动和边壁处的传热传质.图 4 为不同交叉扩散准则数时平均舍伍德数 \overline{Sh}_C 随热瑞利数 Ra 的变化.

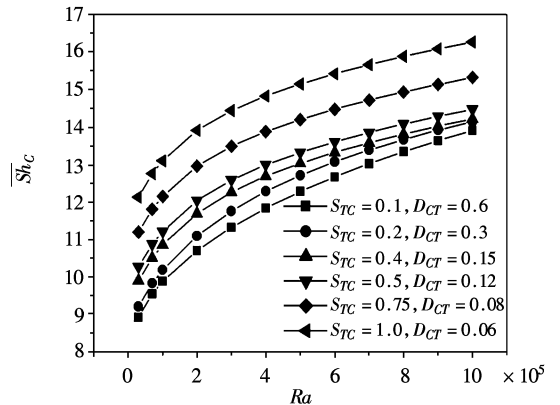


图 4 平均舍伍德数 \overline{Sh}_C 随 Ra 的变化

Fig.4. Effect of Ra on average Sherwood number \overline{Sh}_C

在便于分析瑞利数 Ra 的影响,普朗特数、刘易斯数等保持不变,设 $Pr = 0.7, Ra = 10^5, Le_C = 0.5, Le_H = 1.2, G_{HC} = G_{CH} = 0.1, S_{TC} = S_{TH}, D_{CT} = D_{HT}$.

由图 4 可见,六种不同交叉扩散效应时传质舍

伍德数随热瑞利数的变化规律是相同的,均随着热瑞利数的增加而增大.在热瑞利数相等即流动状态相同时,热扩散准则数 S_{TC} 越大无量纲舍伍德数 \overline{Sh}_c 越大,即总的传质量在增加.这与图3相吻合, S_{TC} 越大扩散作用越强,边壁处浓度梯度越小.其中热扩散作用使得边壁处的 VOCs 向低温区扩散,温度梯度的存在促进了 VOCs 的扩散.

3.3 浮力比 N_C 的影响

同时存在三个梯度驱动力的多物理场中的传热传质问题,各物理量梯度产生的浮升力的相对大小对流动有直接影响.在腔体内平均温度恒定时,三元混合物的密度随着湿度的增加而略有增大,一般情况下湿气浓度差引起的浮升力相对较小,在封闭体系内相对湿度变化不大时可忽略此项;而 VOCs 的物性参数取决于各组分的性质及各组分所占比例,因此 VOCs 的浓度差引起的浮升力与热浮升力之比 N_C 具有不确定性, N_C 对传热传质的影响也较为复杂.

在图1所示边界条件下,温度梯度和湿度梯度产生的浮升力方向相同,为便于分析,保持浮力比 N_H 不变,而 N_C 可取正值或负值,其值取决于 VOCs 气体的物性参数.在分析浮力比 N_C 的变化对流动和传热传质的影响时,假设 $Pr = 0.7$, $Ra = 10^5$, $Le_c = 0.5$, $Le_H = 1.2$, $N_H = 0.5$, $G_{HC} = G_{CH} = 0.1$.

图5为不同交叉扩散系数时下壁面的平均舍伍德数 \overline{Sh}_c 随浮力比 N_C 的变化.当 $N_C < -1.5$ 时, \overline{Sh}_c 随着浮力比的增加而减小,而 $N_C > -1.5$ 时,平均舍伍德数 \overline{Sh}_c 则随着浮力比的增加而增大. $N_C =$

散系准则数 S_{TC} 越大,平均舍伍德数 \overline{Sh}_c 越大,在本文计算条件下温度梯度的存在促进了 VOCs 的对流扩散.

4 结论

基于不可逆过程热力学基本原理,提出三个物理量梯度耦合作用下自然对流传热传质数学模型,并采用 CFD 有限元方法数值分析了建筑室内同时存在温度梯度、湿度梯度和污染物浓度梯度时的多浮升力自然对流传热传质问题,研究过程中考虑了交叉耦合扩散效应的影响.

经计算和分析,展示了不同交叉扩散效应时污染物浓度场的基本状况,分析了热瑞利数、浮力比 N_C 和交叉扩散效应对 VOCs 的传质地影响.浮力比 N_C 存在一个拐点,在该点处多个组分的梯度引起的浮升力相互抵消,传热传质最弱;交叉扩散效应对传质有一定的影响,在边界条件下,温度梯度和 VOCs 浓度梯度方向相同时,热扩散效应准则数 S_{TC} 越大,污染物的传质舍伍德数越大,此时热扩散效应促进了污染物的对流扩散.

参考文献:

- [1] LITTLE J C, HODGSON A T, GADGIL A J. Modeling emissions of volatile organic compounds from new carpets[J]. Atmospheric Environment, 1994, 28(2):227-234.
- [2] ZHANG Yin-ping, XU Ying. Characteristics and correlations of VOC emissions from building materials[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2003, 46(25):4877-4883.
- [3] XU Ying, ZHANG Yin-ping. A general model for analyzing single surface VOC emission characteristics from building materials and its application[J]. Atmospheric Environment, 2004, 38(1):113-119.
- [4] PEDER W, Impact of air velocity, temperature, humidity, and air on long-term VOC emissions from building products[J]. Atmospheric Environment, 1998, 32(14/15):2659-2688.
- [5] ZURAIMI M S. A comparative study of VOCs in Singapore and European office buildings[J]. Building Environment, 2006, 41(3):316-329.
- [6] ECKERT E R G, DRAKE R M. Analysis of heat and mass transfer[M]. New York: McGraw-Hill, 1972.
- [7] MANSOUR A, AMAHMID A, HASNAOUI M. Soret effect on double-diffusive multiple solutions in a square porous cavity subject to cross gradients of temperature and concentration[J]. International Communications in Heat Mass Transfer, 2004, 31(3):431-440.
- [8] 福兰德 K S, 福兰德 T. 不可逆过程热力学——理论及应

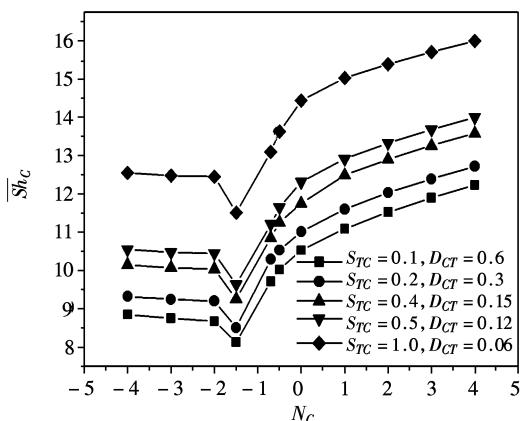


图5 平均舍伍德数 \overline{Sh}_c 随 N_C 的变化

Fig.5 Effect of N_C on average Sherwood number \overline{Sh}_c

-1.5是转折点,并且在该点处传质舍伍德数 \overline{Sh}_c 最小,这是因为 $N_C = -1.5$ 时温湿度引起的浮升力和 VOCs 引起的浓度浮升力大小相等,方向相反,腔体内部的流动最缓慢所致.在浮力比 N_C 相同时,热扩

- 用[M].北京:冶金工业出版社,2001.
- FORLAND K S, FORLAND T. Irreversible thermal-dynamics theory and applications [M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2001.
- [9] TANMAY B, ROY S, BALAKRISHMAN A R. Effects of thermal boundary conditions on natural convection flows within a square cavity [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2006, 49(23/24):4525-4535.
- [10] ADRIAN P. Influence of a magnetic field on heat and mass transfer by natural convection from vertical surfaces in porous media considering solet and dufour effects [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2004, 47(6/7):1467-1472.
- [11] KAFLOSSIAS N G, WILLIAMS E W. Thermal-diffusion and diffusion-thermo effects on mixed free-forced convective and mass transfer boundary layer flow with temperature dependent viscosity [J]. International Journal of Engineering Science. 1995, 33(9):1369-1384.

(编辑:陈燕)