

烟气排放污染的三维数值模拟

汪德¹, 徐建成²

(1. 河海大学水文水资源及环境学院, 江苏 南京 210098; 2. 上海市水务局, 上海 200040)

摘要 根据大气的气象特征和烟流的特点, 选择了包含浮力项的三维 Reynold's 方程组以及温度和浓度的传输方程, 并以 $k-\epsilon$ 紊流模式闭合方程组, 方程组用 SIMPLEC 算法求解. 求解过程中使用逐线递代的三对角矩阵法, 辅以单块和双块修正技术. 模式首先用于静风环境下烟流的传输问题. 然后, 对有风中性层结下烟流的对流-扩散进行模拟, 并将计算结果与实测数据进行对比. 两者吻合较好, 证明了模式的实用性.

关键词 烟流; 大气污染; 浮力; $k-\epsilon$ 紊流模式

中图分类号 X51 **文献标识码** A **文章编号** 1000-198X(2001)06-0001-05

超量烟气排放, 使进入大气污染物的量超过大气的自净能力, 大气的成份、结构和状态发生变化, 破坏了人类正常生活的大气环境和生态系统. 大气的自净(稀释)能力与大气的两大动力因素——风和紊流强度息息相关. 风, 一方面可以将污染物质整体输运到很远的地方; 另一方面携带清洁的空气至排放点附近, 从而降低排放点周围污染物的浓度. 紊流加强了流场各部分间的混合与交换. 清洁空气与烟气流之间的强烈混掺过程, 大大加快了烟气的扩散过程. 在近地层, 这种扩散过程较分子扩散大 $10^5 \sim 10^6$ 倍, 从而增强了大气的稀释能力. 只要我们能取得大气中风和紊流的资料就能对烟气造成的污染范围和浓度作出合理的估计.

研究污染物在大气中传播的方法, 最经典的是高斯扩散模式. 其基本假设是污染物浓度场符合正态分布, 风速与紊流场在传播空间均匀分布. 由于这个假设, 高斯扩散模式不能计入风速、风向的变化和风成剪切紊流的不均匀影响, 不能真实描述污染物的非平稳变化. 应用高斯模式需要确定模式中的基本参数——大气扩散系数. 1961 年, 为了满足利用常规气象资料估算污染浓度的需要, Pasquill 提出一种简单实用的方法^[1], 即将气象条件划分为 6 种稳定度等级, 然后以曲线的形式给出每一种等级的扩散系数. Pasquill-Gifford 扩散曲线应用方便, 至今仍被广泛应用, 并逐步得到改进. 20 世纪 70 年代人们利用数值方法求得扩散方程的数值解, 但其中扩散系数的选择仍具有很大的经验性. 近年来, 紊流模式得以广泛应用, 并引入大气污染紊动扩散的数值计算. 本文即试用三维 Reynold's 方程组, 温度和浓度的对流-扩散方程和三维 $k-\epsilon$ 紊动模式模拟烟气在近地层大气中传输扩散过程.

在近地层大气传输扩散的过程中, 地形、大气稳定等因素对控制方程参数的选择影响很大. 从对流项、扩散项数量级的典型分析中可以得出, 在平坦地形, 中等风速条件下, 水平对流项比水平扩散项要大 1~2 个数量级^[2]. 从而, 水平扩散系数的函数形式并不重要, 近似地取水平扩散系数等于常数, 不会引起大的误差. 水平扩散项的相对重要性取决于所研究空间尺度的大小. 水平尺度越小, 则水平扩散项越显重要. 本文重点研究烟气在近地层大气中的传输扩散过程, 所研究的空间尺度不大, 所以, 水平扩散项的数量级与对流项相当, 且不能取为常数. 本文应用 $k-\epsilon$ 紊流模式, 求出涡粘性系数, 进而求出扩散系数的时、空分布, 再以数值求解控制方程得出烟气在近地层排放口邻近空间中的传输扩散过程.

本文首先利用静风环境下烟气排放恒定过程的模拟对模式进行检验. 然后, 对有风中性层结下的烟气排放传输扩散过程进行模拟. 计算结果与实测资料对比吻合程度较好, 证明了本文的模式可以用于实际小尺度大气污染的预测.

1 控制方程

烟气排放的传输-扩散过程假定不可压缩. 由于烟气的密度 ρ_s 与环境大气的密度 ρ_0 不同, 在垂向的动量方程中必须考虑浮力效应. 一般情况下, ρ_s 与 ρ_0 相差不大, 在其余的方程中, 可用环境大气密度 ρ_0 代替烟气密度 ρ_s . 控制方程组由连续方程、动量方程、温度方程、浓度方程和封闭上述方程的紊流模式方程即 $k-\varepsilon$ 方程组成, 它们是^[3~6]:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = X_i - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\rho_s - \rho_0}{\rho_0} \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_T \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \quad (3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_j \frac{\partial C}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_C \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \quad (4)$$

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P_k - \varepsilon + G \quad (5)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_1 \frac{\varepsilon}{k} (P_k + G) - C_2 \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (6)$$

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad P_k = \nu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad G = \beta g_j K_T \frac{\partial T}{\partial x_j}$$

式中: u_i ——速度分量; p ——压强; X_i ——体积力; g_j ——重力分量; T ——温度; C ——烟气浓度; K_T ——温度扩散系数, $K_T = \frac{\nu_t}{Pr}$; Pr ——Prandtl 数; K_C ——浓度扩散系数, $K_C = \frac{\nu_t}{\sigma_s}$; σ_s ——Schmidt 数; ν_t ——涡粘性系数; k ——紊流动能; ε ——紊流动能耗散率; β ——热膨胀系数. 上式中一项中的重复下标表示对该下标求和.

在上述方程中, 引入了一系列的系数, 分别简要说明如下, 详见有关参考文献. 在一个大气压、温度为 25℃ 条件下, 空气的 Schmidt 数的数值为 0.74^[7]. 在一个大气压下, 空气的 Prandtl 数为 0.71^[8]. $k-\varepsilon$ 模式中的参数, C_μ , C_1 , C_2 , σ_k , σ_ε 采用 Spalding 和 Launder 建议的标准数值. $C_\mu = 0.09$, $C_1 = 1.44$, $C_2 = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\varepsilon = 1.3$ ^[6]. 热膨胀系数 β 表征温度差引起的浮力, 它的定义为

$$\beta = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p$$

对于理想气体, $\beta = 1/T$, T 以绝对温度计. 这样, 假定烟流内的压强与周围大气的压强保持相等, 利用理想气体的关系式 $p = \rho RT$, 有

$$\frac{\rho_s - \rho_0}{\rho_0} = \frac{T_0 - T_s}{T_s} = -\beta (T_s - T_0)$$

以上式代入方程 (2), 可以消去 ρ_s . 方程 (3) 中的温度扩散系数 K_T , 也可以按 Viller^[9] 通过分析多个实验成果和计算结果得到的关系式, 根据 F_0 和 K 值选用. 这里 F_0 是密度 Froude 数, K 是烟气排放速度与排放口处风速之比.

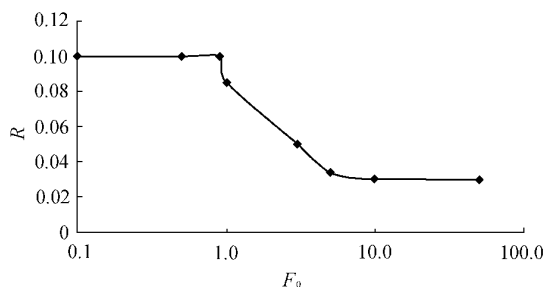


图1 $R \sim F_0$ 的关系曲线

Fig.1 $R \sim F_0$ Relation

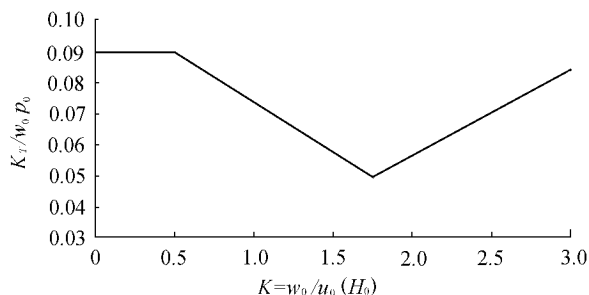


图2 K_T 值

Fig.2 Function of K_T

$$F_0 = \frac{w_0}{\sqrt{\frac{\Delta \rho}{\rho_0} g D_0}} \qquad K = \frac{w_0}{u_n(H_0)}$$

式中： w_0 ——排放口处烟气排放速度； D_0 ——排放口直径； $\Delta \rho = \rho_0 - \rho_s$ ； H_0 ——排放高度； $u_n(H_0)$ ——排放口处风速。 K_T 值按以下 3 种情况确定（a）当 $K \geq 2$ 时， $K_T = K(F_0)w_0D_0$ ， $K(F_0)$ 按 F_0 值从图 1 中选用；（b）当 $K \approx 0.6$ 时， $K_T = 0.03D_0u_n(H_0)$ ；（c） $0.6 < K < 2$ 时，根据 K 值从图 2 中选用 K_T 值。

2 数值计算方法^[10,11]

2.1 控制方程的离散

式（1）~（6）均表示单位体积内某个物理量的守恒。如果将式（1）~（6）写成分量形式，则它们统一为

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u\varphi}{\partial x} + \frac{\partial v\varphi}{\partial y} + \frac{\partial w\varphi}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial z}) + S_\varphi \tag{7}$$

式中： φ 代表某个物理量； u, v, w ——沿 x, y, z 三个方向的速度分量； Γ_φ ——与 φ 对应的扩散系数； S_φ ——源项。式（7）又可以写成：

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} = S_\varphi \tag{8}$$

$J_x = u\varphi - \Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x}$ $J_y = v\varphi - \Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y}$ $J_z = w\varphi - \Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial z}$

利用通用的控制体积法离散式（7），相对于变量 u, v, w 中以压强 p 结点为中心的控制体示于图 3^[10,11]。对于温度 T 和浓度 C, k 和 ϵ 方程的离散，其控制体均与图 3 一样。对于速度分量 u, v, w ，按交错网格的特点，控制体的中心分别置于图 3 的 u_e, v_n, w_t 所在点，即 e, n, t 点处。然后将相应的动量方程沿各自的控制体积分，得到类似的代数表达式。

2.2 计算的初始条件和边界条件

2.2.1 初始条件

假定风速平行于 x 轴，且只是 z 的函数，

$$u = u_n(z) \qquad v = w = 0 \qquad p = 0 \qquad T = T_n(z) \qquad C = 0 \qquad k = 0.01u_n^2(z) \qquad \epsilon = C_\mu \frac{k^2}{\nu_t}$$

2.2.2 边界条件

进口边界条件：进口流速（风速）、温度、浓度（本底浓度取为零）作为本质边界条件给定， $k = 0.01u_{in}^2, \epsilon = C_\mu \frac{k^2}{f}$ ， f 的取值参考 K_T 的讨论取值。

出口边界条件：出口边界取在紊流充分发展，离排放口足够远处，边界条件取 $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$ ， n 为边界面法线方向， φ 代表 $u, v, w, p, k, \epsilon, T, C$ 等量。

固体壁面：速度分量 $u = v = w = 0$ ，对温度 T ，浓度 C ，由于通过壁面的热和浓度的能量很小，可以忽略。本文取 T 和 C 的法向梯度为 0，即 $\frac{\partial T}{\partial n} = 0, \frac{\partial C}{\partial n} = 0$ 。至于 k, ϵ 沿固体壁面的边界条件，类似于

紊动水流中的计算方法，采用通用的壁面律边界条件^[11]。 $k = u_*^2 / \sqrt{C_\mu}, \epsilon = u_*^2 / ky_p$ 。这里， u_* 为固体壁面处摩阻流速， y_p 为边界层粘性底层外缘距壁面的距离。

烟气排放口处边界条件： $w = w_0$ （出流速度）； $v = 0$ ； $u = u_n(H_0)$ ； $C = C_0$ （出流浓度）， $T = T_0$ （出流温度）。

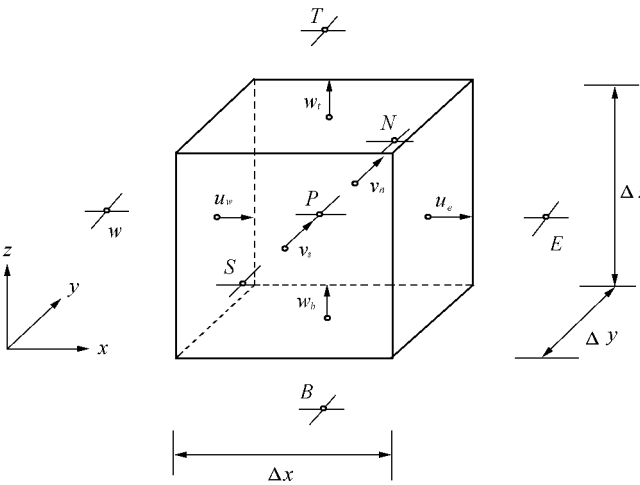


图 3 以压强 p 结点为中心的控制体
Fig.3 Control volume for pressure

2.3 离散方程的求解^[10,11]

本文采用 Patanker 的 SIMPLEC 算法求解离散方程,求解过程中使用逐线递代的三对角矩阵法,辅以单块和双块修正技术。

3 计算实例

首先计算静风环境下烟气排放的传输扩散过程,然后对有风中性层结下烟流的传输扩散过程进行模拟。

3.1 静风均一环境下烟流的传输扩散过程

应用参考文献 9 中的算例进行计算。原文算例是在烟气排入静风均一的大气环境中,用 MAC 法进行计算。为了与前人的实验和计算成果比较,本文通过计算得出沿烟轴向的速度 w 、浓度 C 和紊动动能 k 与高程 z 关系中的系数 A_w 、 A_c 和 A_k 值。计算中取 $C_\mu = 0.09$, $C_1 = 1.44$, $C_2 = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\epsilon = 1.3$, $\nu = 0.15 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$,下垫面粗糙系数取 9.0。

$$\frac{w}{w_0} = A_w \left(\frac{z - z_0}{D_0} \right)^{-1}$$

$$\frac{C}{C_0} = A_c \left(\frac{z - z_0}{D_0} \right)^{-1}$$

$$k = A_k w^2$$

式中 z_0 为烟囱排放口的高程。本文的计算结果与其他研究者的成果列于表 1。从表 1 可见,本文的计算结果与实测资料的符合程度还是比较满意的。

3.2 有风中性层结下烟流的传输扩散过程

文献 9 中给出一个火电站冷却塔排放水汽的算例,本文利用其实测资料来验证本文模型的实用性。设 D_0 为冷却塔排放口的尺度,冷却塔的高度 $H_0 = 1.85 D_0$ 。本文分别计算了 $F_0 = 0.8$ 时, $K = 2, K = 1, K = 0.5, K = 0.33$ 的 4 种情况。图 4 分别给出 4 种情况下计算成果与实测资料的对比。从图可以看出,随着 K 值变小,即风速加大,烟流趋于平坦,这个趋势是合理的。比照浓度等值线的形态和量值,计算成果与实测资料总体上相当一致。计算中用的参数值同上例。 x, y, z 方向的网格数均为 30,网格尺度为 50 m。

表 1 计算结果的比较

Table 1 Comparison of calculated results				
作 者	A_w	A_c	A_k	方法
Wilson	5.0	4.4		实测
Chen & Rodi	6.2	5.0	0.092	实测
Wyganski & Fielderr			0.101	实测
Hossain & Rodi	6.6	5.1		$k-\epsilon$
Moses, Sini & Dekegser	6.4	5.3	0.103	$k-\epsilon$
本文	5.9	4.5	0.107	$k-\epsilon$

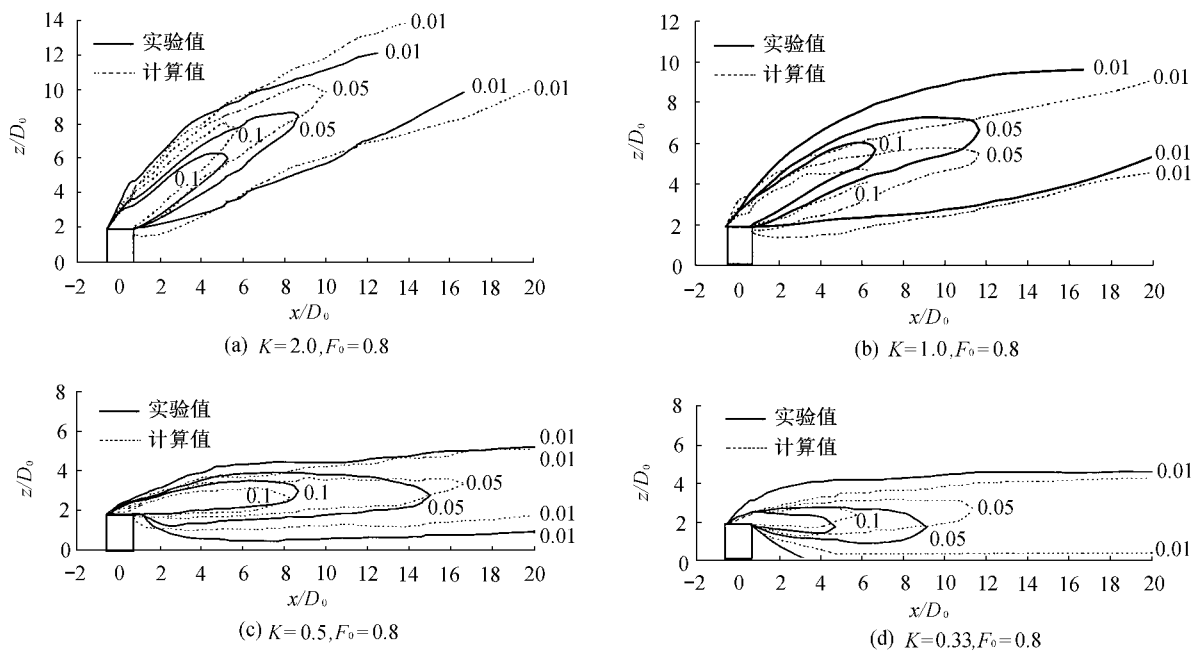


图 4 实测和计算的等浓度线

Fig.4 Measured and computed concentration

4 结 语

采用了考虑浮力作用的三维 Reynold's 方程组、温度和浓度方程及 $k-\epsilon$ 紊流模式组成的数学模型对烟气排放的大气污染问题进行模拟。模型的控制方程用控制体积法进行离散,离散后所得的代数方程组用 SIM- PLEC 算法求解。利用该模型对两个实例进行了计算,计算的结果无论从形态和量值上与实测资料均较一致,显示出该模型的实用价值。因此该模型可以用于小尺度烟气排放污染的预测。

参考文献：

[1] Pasquill F. Lecture on air pollution and environmental impact analysis[A]. American Meteorological Society[C]. USA ,1975.1 ~ 34.
[2] 李宗恺. 空气污染气象学原理及应用[M]. 北京 :气象出版社 ,1985.1 ~ 50.
[3] Panoskey H A ,Dutton J A. Atmospheric turbulence models and methods for engineering application[M]. New York :Wiley and Sons , 1983.1 ~ 100.
[4] Hossain M S ,Rodi W A. Mathematical model for buoyant flows and its application to vertical buoyant jets ,in turbulent buoyant jets and plume[M]. London :Pergamon Press oxford ,1982.1 ~ 50.
[5] Launder B E ,Spalding D B. Mathematical model of turbulence[M]. London :Academic Press ,1972.40 ~ 100.
[6] Moses B O , Sini J F ,Dekegser. $k-\epsilon$ model simulations of vertical jets and plumes in atmospheric environments[A]. The 4th Inter Symp in Refined Flow Model and Turbulence Measurements[C]. Tokyo ,1988 ,335 ~ 342.
[7] Davies V T. Turbulence phenomena[M]. Academic Press ,1972.1 ~ 50.
[8] Gifford F A. Atmospheric dispersion models for enviromental pollution application[A]. Lectures on Air Pollution and Enviromental Impact Analysis[C]. Boston :American Meteorological Society ,1975.35 ~ 58.
[9] Cunge J A ,Abbott M B. Engineering applications of computational hydraulic[M]. Lodon :Pitman ,1982.200 ~ 220.
[10] 汪德 . 计算水力学 理论与应用 [M]. 南京 :河海大学出版社 ,1989.100 ~ 120.
[11] Patanker S V. 传热与流体流动的数值计算[M]. 北京 :科学出版社 ,1985.50 ~ 80.

3-D Modeling of Waste Gas Pollution in Atmosphere

WANG De-guan¹ , XU Jian-chen²

(1. College of Water Resources and Environment , Hohai Univ. , Nanjing 210098 , China ;
2. Shanghai Bureau of Water Management , Shanghai 200040 , China)

Abstract : The waste gas discharged from chimneys may pollute air if the waste gas is contaminated by toxic chemicals or harmful tiny particles. The estimation of air pollution is an important issue for the protection of atmospheric environment. In consideration of the meteorological characteristics of the lower atmosphere and the features of smoky gas , the 3-D Reynold's equations including a buoyancy term , together with the temperature and concentration transport equations are used to simulate the convection , dispersion and diffusion of waste gas , and the equations are closed by the $k-\epsilon$ turbulence model. A SIMPLEC method is employed to obtain the numerical solution of the set of equations. The model is applied to 2 sets of field data : one is obtained in the absence of wind , and the other in the presence of wind. The simulation results are in good agreement with observed data both in pattern and in value. Therefore , the model may be used for small-scale air pollution prediction.

Key words : waste gas ; atmospheric pollution ; buoyancy ; $k-\epsilon$ turbulence model