

# 建筑室内温度分布特性对交叉扩散水平的影响

王 军, 张 旭

(同济大学 暖通空调研究所, 上海 200092)

**摘要:** 基于不可逆热力学, 分析了建筑室内热量、水蒸气组分和污染气体组分之间交叉扩散耦合特征, 并给出了三者之间的交叉扩散传递关系以及温度分布对交叉扩散水平的影响关系, 同时针对室内不同湿度和污染气体浓度水平, 对温度分布影响下的交叉扩散特征与水平进行了具体讨论. 结果表明, 当温度梯度和热附加扩散系数正负相同时, 交叉扩散作用所形成的水蒸气组分梯度和污染气体组分梯度小于零, 反之则大于零; 同时, 在相同温度梯度和热附加扩散作用下, 室内初始湿度和初始污染气体浓度水平越高, 所形成的2种组分梯度的绝对值越大, 并且初始湿度和初始污染气体浓度水平的影响都具有显著性.

**关键词:** 室内温度; 温度分布; 交叉扩散; 传递关系; 耦合特征

中图分类号: TU 834

文献标识码: A

## Influence of Temperature Distribution on Cross Diffusion Level in Building Room

WANG Jun, ZHANG Xu

(Institute of HVAC & Gas Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China)

**Abstract:** The coupling characters of cross diffusion among heat, water vapor and contaminant gas in building room were analyzed according to the non-equilibrium thermodynamic theory. Cross diffusion relationship of heat, water vapor and contaminant gas mass transfer and influence of temperature distribution on cross diffusion level were obtained. The cross diffusion characters and level under different temperature distributions were discussed, for diverse relative humidity and contaminant gas concentration in building room. The results show that water vapor and contaminant gas mass grads are less than zero when temperature grads and thermal diffusion coefficient are both positive/negative, otherwise the two mass grads are more than zero. And the higher the initial humidity and contaminant gas concentration are, the greater the absolute values of water vapor and contaminant gas mass grads

are for the same temperature grads and thermal diffusion coefficient, and influences of initial humidity and initial contaminant gas concentration levels on the two mass grads are remarkable.

**Key words:** indoor temperature; temperature distribution; cross diffusion; transfer relationship; coupling characters

目前影响可接受室内空气品质(acceptable indoor air quality)的最主要因素是气味、尘埃和微生物污染, 而三者产生的基础包括气体组分和颗粒组分. 由于气体组分在扩散特性方面与颗粒组分存在显著差异, 使得气体污染物不仅在很大程度上决定了空气的新鲜度, 而且还对人员区实际获得的新风品质产生显著影响. 因此, 控制气体污染物成为研究的重点与难点<sup>[1]</sup>, 而这一点又集中体现在对气体污染物扩散特性和迁移能力的认识与掌握两方面.

气体污染物在扩散传递过程中受到多物理场(温度场、湿度场和自身浓度场)的影响, 其扩散迁移特性不仅与自身的浓度分布有关, 而且还受到温度、湿度等分布特性的影响<sup>[2-3]</sup>. 出现这种影响的原因在于多物理场的共存不仅使气体组分存在自扩散, 而且还会受到交叉扩散的影响<sup>[4-7]</sup>. 因此, 正确认识和理解建筑室内交叉扩散的特征与水平是有效控制气体污染物的重要前提之一. 然而目前对于建筑室内单纯交叉扩散作用下的热质传递关系研究还鲜有报道. 笔者基于不可逆热力学分析<sup>[8-10]</sup>, 着重研究了温度分布特性对交叉扩散水平的影响关系和影响特征, 为合理认识温度分布与室内组分扩散传递特性的关系提供理论指导.

## 1 交叉扩散传递关系的建立

在非平衡热力学系统中进行的不可逆过程, 热

收稿日期: 2009-01-05

作者简介: 王 军(1983—), 男, 博士生, 主要研究方向为建筑新风量与污染物扩散机理. E-mail: wangjun\_tongji@126.com

张 旭(1955—), 男, 教授, 博士生导师, 工学博士, 主要研究方向为建筑复杂通风技术.

E-mail: zhangxu-hvac@tongji.edu.cn

力学流与热力学力之间存在以下关系:

$$J_i = \sum_j \left( \frac{\partial J_i}{\partial X_j} \right)_0 X_j + \frac{1}{2} \sum_{j,k} \left( \frac{\partial^2 J_i}{\partial X_j \partial X_k} \right)_0 X_j X_k + \dots \quad (1)$$

式中:  $J_i$  为热力学流,  $i$  为热力学流的种类;  $X_j$  为热力学力;  $j, k$  为热力学力的种类.

在线性非平衡区, 忽略高次项可以得到

$$J_i = \sum_{j=1}^n L_{ij} X_j \quad (2)$$

其中, 唯象系数

$$L_{ij} = \left( \frac{\partial J_i}{\partial X_j} \right)_0 \quad (3)$$

根据  $n$  组元向  $n-1$  组元的变换关系, 可以写出相应的热力学力的形式为

$$X_q = - \nabla \left( \frac{1}{T} \right) \quad (4)$$

$$X_i = - \sum_{j=1}^{n-1} A_{ij} \nabla \left( \frac{\mu_j}{T} \right) \quad (5)$$

$$A_{kj} = \delta_{kj} + \frac{\Phi_j}{\Phi_n} \quad i, j, k = 1, 2, \dots, n-1 \quad (6)$$

式中:  $X_q$  为传热过程的热力学力;  $T$  为绝对温度;  $X_i$  为组分扩散过程的热力学力;  $A_{ij}$  为第  $i$  种外延变量;  $\mu_j$  为化学势;  $\delta_{kj}$  为元胞长度;  $\Phi_j$  为  $j$  组元的质量分数.

因此, 可以写出相应的熵产率  $\sigma$  为

$$\sigma = - J_q \nabla \left( \frac{1}{T} \right) - \sum_{i=1}^{n-1} J_i A_{ij} \nabla \left( \frac{\mu_j}{T} \right) \quad (7)$$

式中:  $J_q$  为传热过程的热力学流;  $J_i$  为组分扩散过程的热力学流.

从而相应的线性唯象方程为

$$J_q = L_{tt} \nabla \left( \frac{1}{T} \right) + \sum_{j,k=1}^{n-1} L_{tk} \left[ - A_{kj} \nabla \left( \frac{\mu_j}{T} \right) \right] \quad (8)$$

$$J_i = L_{it} \nabla \left( \frac{1}{T} \right) + \sum_{j,k=1}^{n-1} L_{ik} \left[ - A_{kj} \nabla \left( \frac{\mu_j}{T} \right) \right] \quad (9)$$

式中:  $L_{tt}$  为温差驱动热传导时的唯象系数;  $L_{tk}$  为组分扩散所引起的与热扩散过程有关的唯象系数;  $L_{it}$  为热扩散所引起的与组分扩散过程有关的唯象系数;  $L_{ik}$  为组分扩散过程的唯象系数.

式(8)和式(9)中所对应的 Onsager 倒易关系为

$$L_{it} = L_{ti} \quad (10)$$

$$L_{ik} = L_{ki} \quad (11)$$

根据居里原理可知, 建筑空间热、水蒸气组分和污染气体组分扩散传递过程中所对应的热力学力存

在交叉效应, 在不考虑其他热力学力的前提下, 可以得到相应的扩散流分别为

$$J_q = L_{ct} X_c + L_{ht} X_h + L_{tt} X_t \quad (12)$$

$$J_h = L_{ch} X_c + L_{hh} X_h + L_{ht} X_t \quad (13)$$

$$J_c = L_{cc} X_c + L_{ch} X_h + L_{ct} X_t \quad (14)$$

式中:  $J_h$  为水蒸气组分扩散过程的热力学流;  $J_c$  为污染气体组分扩散过程的热力学流;  $L_{ct}$  为污染气体组分扩散所引起的与热扩散过程有关的唯象系数;  $L_{ht}$  为水蒸气组分扩散所引起的与热扩散过程有关的唯象系数;  $L_{ch}$  为污染气体组分扩散所引起的与水蒸气组分扩散过程有关的唯象系数;  $L_{hh}$  为水蒸气组分扩散过程的唯象系数;  $L_{cc}$  为污染气体组分扩散过程的唯象系数.

根据式(4)和式(5), 可以得到式(12)~(14)中各个热力学力的形式为

$$X_t = - \frac{1}{T^2} \nabla T \quad (15)$$

$$X_h = - \left[ \frac{A_{hh}}{T} \left( \frac{\partial \mu_h}{\partial c} \right)_{p,T,h} + \frac{A_{hc}}{T} \left( \frac{\partial \mu_c}{\partial c} \right)_{p,T,h} \right] \nabla c - \left[ \frac{A_{hh}}{T} \left( \frac{\partial \mu_h}{\partial h} \right)_{p,T,c} + \frac{A_{hc}}{T} \left( \frac{\partial \mu_c}{\partial h} \right)_{p,T,c} \right] \nabla h \quad (16)$$

$$X_c = - \left[ \frac{A_{cc}}{T} \left( \frac{\partial \mu_c}{\partial h} \right)_{p,T,c} + \frac{A_{ch}}{T} \left( \frac{\partial \mu_h}{\partial h} \right)_{p,T,c} \right] \nabla h - \left[ \frac{A_{cc}}{T} \left( \frac{\partial \mu_c}{\partial c} \right)_{p,T,h} + \frac{A_{ch}}{T} \left( \frac{\partial \mu_h}{\partial c} \right)_{p,T,h} \right] \nabla c \quad (17)$$

式中:  $X_t$  为传热过程的热力学力;  $X_h$  为水蒸气组分扩散过程的热力学力;  $X_c$  为污染气体组分扩散过程的热力学力;  $A_{hh}$  为水蒸气组分扩散过程的外延变量;  $A_{hc}$  为污染气体组分扩散所引起的与水蒸气组分扩散过程有关的外延变量;  $A_{cc}$  为污染气体组分扩散过程的外延变量;  $A_{ch}$  为水蒸气组分扩散所引起的与污染气体组分扩散过程有关的外延变量;  $\mu_h$  为水蒸气组分的化学势;  $\mu_c$  为污染气体组分的化学势;  $h, c$  分别为水蒸气组分和污染气体组分的质量分数;  $p$  为压力.

为了取代式(12)~(14)中的唯象系数, 引入以下系数:

$$\lambda = \frac{L_{tt}}{T^2} \quad (18)$$

$$D_{th} = \frac{L_{ht}}{\rho(1-c-h)hT^2} \quad (19)$$

$$D_{tc} = \frac{L_{ct}}{\rho(1-c-h)cT^2} \quad (20)$$

$$D_{hh} = \frac{1}{\rho(1-c-h)T} \left\{ [L_{ch}(1-h) + L_{hh}c] \left( \frac{\partial \mu_c}{\partial h} \right)_{p,T,c} + [L_{ch}h + L_{hh}(1-c)] \left( \frac{\partial \mu_h}{\partial h} \right)_{p,T,c} \right\} \quad (21)$$

$$D_{cc} = \frac{1}{\rho(1-c-h)T} \left\{ [L_{cc}(1-h) + L_{ch}c] \left( \frac{\partial \mu_c}{\partial c} \right)_{p,T,h} + [L_{cc}h + L_{ch}(1-c)] \left( \frac{\partial \mu_h}{\partial c} \right)_{p,T,h} \right\} \quad (22)$$

$$D_{ht} = \frac{1}{\rho(1-c-h)chT^2} \left\{ [L_{ct}(1-h) + L_{ht}c] \left( \frac{\partial \mu_c}{\partial h} \right)_{p,T,c} + [L_{ct}h + L_{ht}(1-c)] \left( \frac{\partial \mu_h}{\partial h} \right)_{p,T,c} \right\} \quad (23)$$

$$D_{ct} = \frac{1}{\rho(1-c-h)chT^2} \left\{ [L_{ct}(1-h) + L_{ht}c] \left( \frac{\partial \mu_c}{\partial c} \right)_{p,T,h} + [L_{ct}h + L_{ht}(1-c)] \left( \frac{\partial \mu_h}{\partial c} \right)_{p,T,h} \right\} \quad (24)$$

$$D_{ch} = \frac{1}{\rho(1-c-h)chT^2} \left\{ [L_{ch}(1-h) + L_{hh}c] \left( \frac{\partial \mu_c}{\partial c} \right)_{p,T,h} + [L_{ch}h + L_{hh}(1-c)] \left( \frac{\partial \mu_h}{\partial c} \right)_{p,T,h} \right\} \quad (25)$$

$$D_{hc} = \frac{1}{\rho(1-c-h)chT^2} \left\{ [L_{cc}(1-h) + L_{ch}c] \left( \frac{\partial \mu_c}{\partial h} \right)_{p,T,c} + [L_{cc}h + L_{ch}(1-c)] \left( \frac{\partial \mu_h}{\partial h} \right)_{p,T,c} \right\} \quad (26)$$

式中:  $\lambda$  为气体导热系数;  $\rho$  为密度;  $D_{th}$  和  $D_{tc}$  分别为温度梯度引起的水蒸气组分扩散系数和污染气体组分扩散系数;  $D_{hh}$  和  $D_{cc}$  分别为等温扩散过程中水蒸气组分扩散系数和污染气体组分扩散系数;  $D_{ht}$  和  $D_{ct}$  分别为水蒸气组分梯度引起的热扩散系数和污染气体组分梯度引起的热扩散系数;  $D_{ch}$  和  $D_{hc}$  分别为污染气体组分梯度引起的水蒸气组分扩散系数和水蒸气组分梯度引起的污染气体组分扩散系数。

将上述系数带入式(12)~(14)可以得到

$$J_q = -\rho c h T D_{ct} \nabla c - \rho c h T D_{ht} \nabla h - \lambda \nabla T \quad (27)$$

$$J_h = -\rho c h T D_{ch} \nabla c - \rho D_{hh} \nabla h - \rho(1-c-h)h D_{th} \nabla T \quad (28)$$

$$J_c = -\rho D_{cc} \nabla c - \rho c h T D_{hc} \nabla h - \rho(1-c-h)c D_{tc} \nabla T \quad (29)$$

因此,建筑空间传递过程中包含热量、水蒸气、污染气体组分之间交叉扩散效应的传递关系得以建立。

## 2 温度分布特性对交叉扩散水平的影响

室内温度分布特性对交叉扩散传递过程的影响在于由温度梯度引起水蒸气组分和污染气体组分产生的热附加扩散效应,在热附加扩散效应的作用下会使相应组分形成浓度梯度,而浓度梯度又产生与热附加扩散效应相反方向的质扩散,当热附加扩散与相反方向的质扩散达到平衡时,整个热力系统处于定态.因此,为了分析室内温度分布特性的影响作用,引入以下交叉扩散系数:

$$S_{th} = \frac{D_{th}}{D_{hh}} \quad (30)$$

$$S_{tc} = \frac{D_{tc}}{D_{cc}} \quad (31)$$

$$G_{ch} = \frac{D_{ch}}{D_{hh}} \quad (32)$$

$$G_{hc} = \frac{D_{hc}}{D_{cc}} \quad (33)$$

式中:  $S_{th}$  和  $S_{tc}$  为 Soret 系数;  $G_{ch}$  和  $G_{hc}$  为 Hertz 系数。

同时,根据定态特征有

$$J_h = 0 \quad (34)$$

$$J_c = 0 \quad (35)$$

从而,由式(28)和式(29)可以得到

$$G_{ch} \nabla c + \frac{1}{chT} \nabla h + \frac{(1-c-h)}{cT} S_{th} \nabla T = 0 \quad (36)$$

$$\frac{1}{chT} \nabla c + G_{hc} \nabla h + \frac{(1-c-h)}{hT} S_{tc} \nabla T = 0 \quad (37)$$

由于式(36)和式(37)中的  $\nabla c$  和  $\nabla h$  是基于  $\nabla T$  而形成,因此,式(36)中左边第1项和式(37)中左边第2项与其他项相比是小量,可近似忽略,从而可以得到

$$\nabla h = -(1-c-h)hS_{th} \nabla T \quad (38)$$

$$\nabla c = -(1-c-h)cS_{tc} \nabla T \quad (39)$$

基于室内相对湿度的基本波动范围以及以  $\text{CO}_2$  为代表的污染气体浓度所引起的危害程度考虑,确定室内的初始湿度水平和污染气体浓度水平分别按照3种情形考虑,如表1所示。

图1和图2针对表1所列的6种情形分别给出了温度分布特性对交叉扩散作用下水蒸气组分和污染气体组分分布的影响。

表1 初始湿度水平和污染气体浓度水平  
Tab.1 Initial relative humidity and contaminant gas concentration level

工况	初始相对湿度水平/%	初始污染气体组分质量分数/%
1	40	0.048
2	60	0.048
3	80	0.048
4	60	0.152
5	60	0.228
6	60	0.303

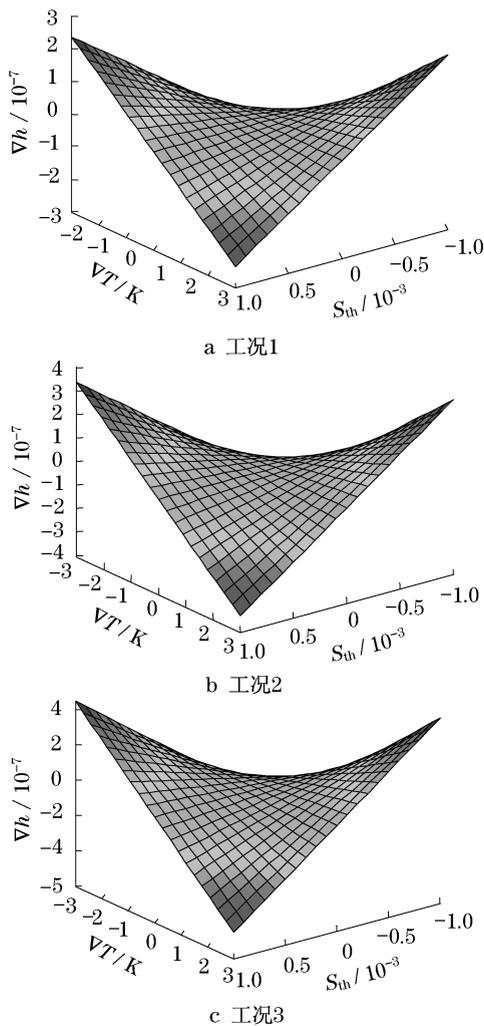


图1 交叉扩散作用下温度分布对水蒸气组分的影响  
Fig.1 Influence of temperature distribution on vapor distribution with cross diffusion effect

根据图1可以发现,当温度梯度 $\nabla T$ 大于零时,若 $D_{th}$ 大于零,即 $S_{th}$ 大于零,水蒸气组分向温度低的方向扩散,即热附加扩散流的方向与 $\nabla T$ 的方向相反,从而形成的 $\nabla h$ 小于零;若 $D_{th}$ 小于零,即 $S_{th}$ 小于零,水蒸气组分向温度高的方向扩散,此时热附加扩散流的方向与 $\nabla T$ 的方向相同,从而形成的 $\nabla h$ 大

于零.对于 $\nabla T$ 小于零的情况,根据 $D_{th}$ 的正负,可以推得 $\nabla h$ 的正负与 $\nabla T$ 大于零时的结果相反.与此同时,热附加扩散效应所形成的水蒸气组分梯度会产生自扩散,与热附加扩散方向相反,当过程进行的时间达到特征时间以后,自扩散与热附加扩散达到平衡,系统表现为定态.

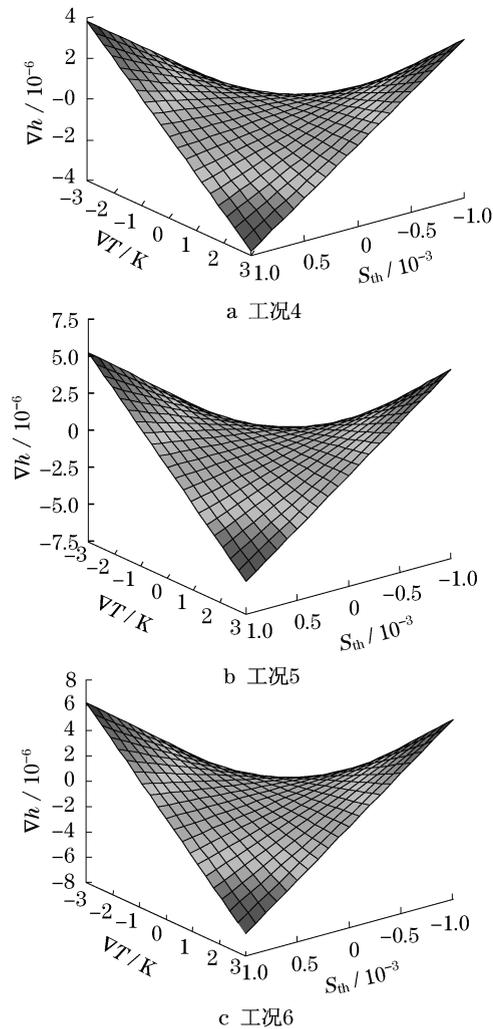


图2 交叉扩散作用下温度分布对污染气体的影响  
Fig.2 Influence of temperature distribution on contaminant gas distribution with cross diffusion effect

此外,由图1还可以看到,室内初始相对湿度越高,在相同的温度梯度和热附加扩散效应作用下,所形成的水蒸气组分梯度的绝对值越大.具体而言,当初始相对湿度提高50%, $\nabla h$ 的绝对值提高约44.01%;当初始相对湿度提高100%, $\nabla h$ 的绝对值提高约91.20%;由此可以看到,初始相对湿度与热附加扩散效应形成的水蒸气组分梯度绝对值正相关,且初始湿度水平的影响具有显著性.

在图2中,当 $\nabla T$ 大于零时,若 $D_{tc}$ 大于零,即 $S_{tc}$

大于零,污染气体组分向温度低的方向扩散,即热附加扩散流的方向与 $\nabla T$ 的方向相反,从而形成的 $\nabla c$ 小于零;若 $D_{tc}$ 小于零,即 $S_{tc}$ 小于零,污染气体组分向温度高的方向扩散,此时热附加扩散流的方向与 $\nabla T$ 的方向相同,所形成的 $\nabla c$ 大于零.对于 $\nabla T$ 小于零的情况,由 $D_{tc}$ 的正负,可以推得 $\nabla c$ 的正负与 $\nabla T$ 大于零时的结果相反.对于以上4种情形,热附加扩散效应所形成的污染气体组分梯度会产生自扩散,与热附加扩散方向相反,当过程进行的时间达到特征时间以后,自扩散与热附加扩散达到平衡,系统表现为定态.

同时,由图2可以发现,室内初始污染气体浓度越高,在相同的温度梯度和热附加扩散效应作用下,所形成的污染气体组分梯度的绝对值越大.当初始污染气体浓度提高50%, $\nabla c$ 的绝对值提高约36.36%;当初始污染气体浓度提高99%, $\nabla c$ 的绝对值提高约66.33%.因此,初始污染气体浓度水平与热附加扩散效应形成的污染气体组分梯度绝对值正相关,并且初始污染气体浓度水平对污染气体组分梯度的绝对值具有显著影响.

由交叉扩散作用下温度分布对水蒸气组分和污染气体组分的影响关系可以看到,为了更好地使现代室内环境满足局部空间局部时间的控制目标,在改善IAQ(indoor air quality)的过程中,应该重视对初始阶段环境参数的控制,并且控制策略的选择要基于初始环境参数的水平.

### 3 结论

从不可逆热力学角度出发,在对建筑室内交叉扩散传递关系以及温度分布特性影响分析的基础上,得到以下主要结论:

(1) 基于不可逆热力学分析,建立了建筑室内涵盖热量、水蒸气组分和污染气体组分之间的交叉扩散传递关系.

(2) 温度梯度和热附加扩散系数正负相同时,

所形成的水蒸气组分梯度和污染气体组分梯度小于零,温度梯度和热附加扩散系数正负相异时,所形成的水蒸气组分梯度和污染气体组分梯度大于零.

(3) 在相同的温度梯度和热附加扩散效应作用下,室内初始相对湿度越高所形成的水蒸气组分梯度的绝对值越大且初始湿度水平的影响具有显著性.

(4) 在相同的温度梯度和热附加扩散效应作用下,室内初始污染气体浓度越高,所形成的污染气体组分梯度的绝对值越大,且初始污染气体浓度水平对此也具有显著影响.

### 参考文献:

- [1] Yu B F, Hu Z B. Review of research on air-conditioning systems and indoor air quality control for human health [J]. International Journal of Refrigeration, 2009, 32: 3.
- [2] Peder Wolkoff. Impact of air velocity, temperature, humidity and air on long-term VOC emissions from building products [J]. Atmospheric Environment, 1998, 32(14): 2659.
- [3] Gant S E, Kelsey A. Factors influencing the indoor transport of contaminants and modeling implications [R]. Buxton: Health & Safety Laboratory, 2006.
- [4] Kempers L J T M. A comprehensive thermodynamic theory of the cross-effect in isothermal diffusion in a multicomponent gas, liquid or solid [J]. Journal of Chemical Physics, 2001, 115(14): 6342.
- [5] Lhost O, Platten J K. Large-scale convection induced by sorot effect [J]. Physical Review A, 1989, 40(11): 6415.
- [6] Eckert E R G, Drake R M. Analysis of heat and mass transfer [M]. New York: Mc Graw Hill, 1972.
- [7] Ryzhkov Ilya I. On the cross-diffusion and Soret effect in multicomponent mixtures [J]. Microgravity Sci Technol, 2008, 10: 1007.
- [8] Bird R B, Stewart W E. Transfer phenomena [M]. New York: John Wiley & Sons Inc, 2002.
- [9] James R Welty, Charles E Wicks. Fundamentals of momentum, heat and mass transfer [M]. New York: John Wiley & Sons Inc, 2000.
- [10] Cengel Yunus. Heat and mass transfer: a practical approach [M]. New York: McGraw-Hill Education, 2006.