

FUZA DIXING TIAOJIANXIA
ZHONGQI KUOSAN SHUZHIMONI

复杂地形条件下 重气扩散数值模拟

宁平 孙 曷 侯明明 著



冶金工业出版社
Metallurgical Industry Press

复杂地形条件下 重气扩散数值模拟

宁 平 孙 嵩 侯明明 著

北 京
冶 金 工 业 出 版 社
2013

内 容 提 要

全书共分7章, 主要包括: 重气扩散的个旧地形风洞实验和 Thorney 场地测试数据引用; 重气扩散相关机理, 包括传输模型、泄漏源喷射模型和重气液滴云团参与的重气扩散模型的建立; 流体动力学偏微分方程组算法优化和改进; 以存在规则障碍物的 Thorney 场地测试 26 和以曲折山地城市地貌为背景的风洞实验的测试结果为复杂地形条件的两种典型情景, 使用实验数据对改进的浅层模型和 CFD 模型进行验证; 模型对动态、气态喷射源条件下不同泄漏口面积重气扩散污染模拟的比较和恒定喷射源条件下存在重气液滴相时的重气和液滴重气云团的扩散行为模拟。

本书对从事重气扩散研究及管理的人员具有一定的参考价值, 同时可供高等院校相关专业的师生阅读。

图书在版编目(CIP)数据

复杂地形条件下重气扩散数值模拟/宁平, 孙嵩, 侯明明著. —
北京: 冶金工业出版社, 2013. 8

ISBN 978-7-5024-6349-6

I. ①复… II. ①宁… ②孙… ③侯… III. ①有毒气体—
气体扩散—数值模拟 IV. ①X51

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2013) 第 203726 号

出 版 人 谭学余

地 址 北京北河沿大街嵩祝院北巷 39 号, 邮编 100009

电 话 (010)64027926 电子信箱 yjchs@cnmip.com.cn

责任编辑 郭冬艳 美术编辑 杨 帆 版式设计 杨 帆

责任校对 李 娜 责任印制 张祺鑫

ISBN 978-7-5024-6349-6

冶金工业出版社出版发行; 各地新华书店经销; 北京慧美印刷有限公司印刷

2013 年 8 月第 1 版, 2013 年 8 月第 1 次印刷

169mm×239mm; 9.25 印张; 175 千字; 135 页

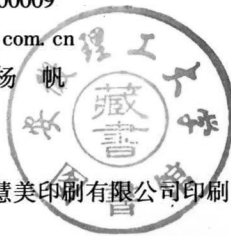
29.00 元

冶金工业出版社投稿电话: (010)64027932 投稿邮箱: tougao@cnmip.com.cn

冶金工业出版社发行部 电话: (010)64044283 传真: (010)64027893

冶金书店 地址: 北京东四西大街 46 号(100010) 电话: (010)65289081(兼传真)

(本书如有印装质量问题, 本社发行部负责退换)



前 言

密度大于空气的有毒有害化工气体或日常生产生活用气（如液化气等）的泄漏会导致事故的发生。密度大于空气的有毒有害化工气体的泄漏更易导致大规模人员伤亡事故的发生，原因在于其较高的密度容易形成爬流聚集在地表附近人口较多区域，不易扩散。

关于重气扩散的研究国外开展得比较多，主要集中在讨论不同地形、气候等条件下重气的扩散规律，为安全风险评估和紧急预案的科学设定提供研究依据。国内对于重气的研究尚处于初级的阶段，进行场地实验、风洞实验的并不多。一般采用商用软件进行重气扩散问题的数值模拟研究，但缺乏对与具体扩散情景的模型设计，更缺乏针对适应重气扩散的流体动力学模型算法的研究。目前化工以及环境工程的快速发展，安全生产以及危险事故防范及预警相关工作的重要性凸显，研究重气泄漏扩散的紧迫性日渐突出。

对重气泄漏和扩散问题的研究有助于防范危险事故的发生，规避不必要的人员伤亡和经济损失。气体的传递现象与诸多因素有关，具有复杂性和综合性特点，客观、完整、细致的重气泄漏和扩散行为研究能够为风险评估提供科学依据，对风险预报具有重要的理论和现实意义。

研究重气扩散的方法主要有：场地实验测试研究、风洞实验模拟研究以及数学模型模拟研究。也有使用数学模型模拟与实验或测试相结合的方法讨论不同类型重气的扩散问题。

我们以重气扩散的数学模型为主要研究对象，综述比较了工程模型和研究模型的各自特点；在重气扩散的模型设计规范和模型评价标准的基础上，具体改进提高了二维浅层模型和三维流体动力学（CFD）

模型, 并对三维 CFD 模型提出了基于地形形态坐标变换的全新应用方法, 同时对重气泄漏喷射产生液滴情况下两相混合流情形建立了液滴云团和气体混合体系的相间传质和传输模型。同时强调了, 在浅层模型和 CFD 模型地形和大气边界层湍流对重气扩散的影响。本书主要研究方法包括: 重气扩散和传递现象的相关机理分析、针对云南个旧市地形和边界层风场条件的风洞实验、基于守恒律建立数学模型、偏微分方程组算法的数值分析和使用 Thorney Island 场地测试 26 和风洞实验结果与模型比对。

二维浅层模型和三维 CFD 模型各自应用的目的不同。前者属于能够做出快速预报的工程应用模型, 后者是完整的机理模型。本书用这两个模型分别对重气扩散工程模型和理论模型的研究, 并以应用研究为主, 突出具有快速预报应用优势的浅层模型的改进。书中对重气喷射泄漏伴随产生的重气液滴的现象作了讨论, 结合两相重气体系中液滴尺寸分布统计平衡、相变能量守恒和相间动态传质三个方面的关系建立两相的重气传播模型。本书所涉及的泄漏源为点源。作为完整的模型研究, 本书在充分理论分析的基础上, 对流体动力学偏微分方程组算法做出了改进和优化。

本书第 1 章为绪论; 第 2 章为个旧重气扩散地形风洞实验和 Thorney 场地测试数据引用; 第 3 章为重气扩散相关机理研究和包括传输模型、泄漏源喷射模型和重气液滴云团参与的重气扩散模型的建立; 第 4 章为流体动力学偏微分方程组算法优化和改进; 第 5 章为分别以存在规则障碍物的 Thorney 场地测试 26 和以曲折山地城市地貌为背景的风洞实验的测试结果为复杂地形条件的两种典型情景, 使用实验数据对我们改进的浅层模型和 CFD 模型进行验证的研究; 第 6 章为模型对两种喷射泄漏情况的模拟预报研究, 这两种情况分别是动态、气态喷射源条件下不同泄漏口面积重气扩散污染模拟比较研究和恒定喷射源条件下存在重气液滴相时的重气和液滴重气云团的扩散行为模拟研究; 第 7 章为全书总结。

值得一提的是,本书在算法的研究中,压力修正部分使用了最优化的方法,而最优化方法多被用于经济学等学科的研究,目前尚未见被直接用于算法的研究领域。由于最优化方法有提前设定优化目标的特点,可以说这种方法属于“软科学方法”。同时本书对重气在复杂地形条件下扩散的应用模拟中使用了坐标变换的数学方法,并且在附录中给出了其推导过程。这种方法对于山地地表形态的可导地表曲面条件下的流体动力学问题具有一般性,在应用研究中有理论创新,这使用了“硬科学”数学手段。可以说这种“软硬结合”的研究手段在应用研究中颇具特点——一方面遵守了理论的严整性,另一方面变通适应于实际的预报应用。

本书的研究旨在完善和改进适应于重气扩散、传播的预报和研究的数值模拟手段。研究所形成的算法集成和软件能够成为决策辅助工具,在风险评估和紧急预案制订方面有商业和研究应用的潜力。

本书能够与读者见面离不开大家的支持和帮助,恕我们不能一一列举其姓名,在此向他们表示真诚的感谢。特别提出感谢的是已故南洋理工大学宴蓉博士,她所坚持的规范和务实的研究风格对我们的研究颇有影响;感谢云南师范大学化存才教授对研究当中的数学理论证明部分提出了关键性的修改意见;感谢云南大学王家强教授,昆明理工大学田森林、马丽萍教授,云南师范大学太阳能所李明教授和昆明贵金属研究所张爱敏研究员对本项研究某些细节部分以及书稿修改等方面提出的宝贵意见。

最后,限于作者的水平,本书难免有疏漏和不足之处,敬请广大读者批评指正。

著 者

2013年4月

目 录

1 绪论	1
1.1 背景与意义	1
1.2 重气扩散主要过程和影响因素	4
1.3 重气扩散模型评价标准	5
1.4 重气扩散模型	9
1.4.1 泄漏源模型	9
1.4.2 重气扩散模型	13
1.4.3 大气边界层量化研究	18
1.4.4 流体动力学模型算法	25
1.5 工作和创新	27
1.6 本章小结	28
2 实验和数据收集	30
2.1 个旧地形液化气泄漏风洞实验	30
2.1.1 风洞实验相似性准则	30
2.1.2 个旧地理环境概要	32
2.1.3 环境风廓线的测定	32
2.1.4 环境风洞实验设置	34
2.1.5 环境风洞实验结果	37
2.2 Thorney Island 场地实验简介及数据引用	38
2.3 本章小结	40
3 数学模型的建立	41
3.1 重气扩散相关物理分析	41
3.1.1 泄漏喷射过程分析	41

3.1.2 喷射源模型与传输模型的结合	42
3.1.3 重气液滴与两相流分析	43
3.1.4 大气稳定度与边界层风速	46
3.1.5 边界层大气湍流和主要湍流模型	48
3.1.6 Smagorinsky - Lilly 湍流模型	51
3.2 框架模型	52
3.2.1 改进的重气浅层模型	52
3.2.2 三维重气传播扩散模型	58
3.3 辅助模型	60
3.3.1 泄漏源模型	60
3.3.2 含重气液滴的重气传播扩散模型	61
3.4 本章小结	64
4 数值算法	65
4.1 传统有限差分算法中的问题	65
4.1.1 线性化 Burgers 项差分方法	65
4.1.2 迎风格式	66
4.2 半离散格式	67
4.3 算法的时间积分方案和优化	69
4.3.1 交错时间步的时间积分方案	69
4.3.2 算法叠加原理	70
4.3.3 速度方程组的耦合	71
4.4 压力修正的最优化方法	72
4.4.1 最优化压力修正方法的提出	72
4.4.2 最优化压力修正的算法	75
4.4.3 计算实例	78
4.5 本章小结	80
5 数值模拟和模型检验	81
5.1 Thorney 测试 26 的二维浅层模型模拟与检验	81
5.1.1 数值模拟的设定	81
5.1.2 模拟结果	82
5.1.3 模拟与实验的比较	86

5.2 个旧地形风洞实验改进的二维浅层模型模拟与检验	88
5.2.1 数值模拟的设定	88
5.2.2 模拟结果	89
5.2.3 模拟与实验的比较	92
5.3 个旧地形风洞实验改进的三维 CFD 模型模拟与检验	94
5.3.1 数值模拟的设定	94
5.3.2 模拟结果	98
5.3.3 模拟与实验的比较	101
5.4 本章小结	103
6 模型预报	104
6.1 二维浅层模型对不同泄漏口面积的重气扩散预报	104
6.2 二维浅层模型对含重气液滴的重气体系的扩散预报	106
6.3 三维 CFD 模型对含重气液滴的重气体系的扩散预报	110
6.4 本章小结	111
7 总结和展望	112
7.1 结论	112
7.2 创新和进步	112
7.3 展望和建议	113
附录	115
附录 A 不同分类标准的相关性	115
附录 B 二维浅层模型方程的推导	117
附录 C 两相重气体系重气液滴相和气相间的传质模型的推导	120
附录 D 三维模型地曲面坐标下梯度、散度和旋度算子的确定	121
参考文献	123
符号说明	129

1 绪 论

1.1 背景与意义

化工工业以及石油工业中危险有害气体的泄漏灾害时有发生。危险有害气体或液化气在大规模生产、储存以及运输工程当中随时存在泄漏或不可控释放的危险。有害气体进入大气环境将危害人们的生命安全，易燃易爆气体容易导致爆炸和火灾的发生而造成重大经济损失，甚至部分化工气体的泄漏将造成生态问题长期影响环境而难以挽回。特别是重气（Dense Gas 或 Heavy Gas）——密度大于空气的一类有害气体或气体与重气液滴两相混合物质的泄漏的危害更大。《环境影响评价技术导则—大气环境》（HJ2.2—2008）中指出大气污染源排放的污染物按存在形态分为颗粒污染物和气态污染物，其中粒径小于 $15\mu\text{m}$ 的污染物亦可划分为气态污染物。重气一类属于大气污染物范畴。

由于重气相对密度大的特点，重气一旦泄漏或喷射，其传播和扩散往往集中在地表附近风速较低、人口较为集中区域，尤其易于造成人员伤害。并且，诸如液化气、液氯等在内的高压存储或低沸点气体，喷射后形成悬浮重气液滴，更易集中在地表附近，难以扩散和被环境大气稀释。表 1-1 总结了近 40 年来部分国内外重大污染气体泄漏事故的概况^[1~5]。从表中可以看出，偶发的重气一类污染有害气体的泄漏事故往往带来巨大的人员和经济损失。一些化工泄漏物质在环境中发生反应产生重气有毒、有害气体造成二次污染，如 2001 年大连的三氯氧磷泄漏产生磷酸和氯化氢气体。根据相关统计，在有害化工废气造成的事故当中，约 90% 与重气泄漏有关，重气泄漏造成人员伤亡的占 99.05%^[4, 5]。

表 1-1 国内外部分重气泄漏事故概况

年份	地 点	泄漏物质	是否后续发生爆炸事故	人员受灾情况
1979	我国浙江温州电化厂	液氯	无	死 59 人，伤 800 人
1984	印度博帕尔市	异氰酸甲脂	无	死 3150 人，伤 7 万余人
1987	美国得克萨斯市马拉松石油公司	氢氟酸	无	4000 人受灾
1989	美国得克萨斯石油化工厂	异丁烷	无	不详
1991	我国江西省沙溪县农药运输车辆泄漏	甲胺	无	死 42 人，伤 595 人
1998	我国西安市煤气公司液化气管理所	液化气	有	死 11 人，伤 33 人

续表 1-1

年份	地 点	泄漏物质	是否后续发生 爆炸事故	人员受灾情况
2001	我国大连松辽化工公司	三氯氧磷	无	57 人中毒
2002	我国株洲市白石港航运码头	氯气泄漏	无	百余人中毒
2004	我国齐齐哈尔	氯气	无	130 人中毒
2004	我国漯河市郾城县气罐车泄漏	液氯	无	2.4 万人疏散
2004	我国重庆天原化工总厂	氯气泄漏	有	十余人死伤
2004	我国陕西省榆林市神木县天然气 管道被挖裂	天然气	无	4000 人受灾
2005	我国江苏省淮阴市境内京沪高速路 运输车泄漏	液氯	无	死 29 人

参照当时的新闻报道，这里将几个重大重气泄漏事故的情况略作介绍。

(1) 1998 年西安市煤气公司液化气管理所液化气泄漏事故。1998 年 3 月 5 日 16 时 38 分，西安市煤气公司石油气管理所存储罐区发生液化石油气泄漏爆燃事故。操作人员巡查，发现 1 个 400m³ 球罐底部喷出液化气，管理所职工和消防人员采取紧急措施但最终未能堵住。18 时 50 分发生第一次爆炸。大火蔓延整个灌区。19 时 25 分发生第二次爆炸，20 时发生第三次爆炸。最终引发 2 台 400m³ 球罐爆裂燃烧。直到 3 月 6 日 6 时火势才得到基本控制。此次事故造成直接经济损失 477 万元，死亡 12 人，受伤 30 人。

(2) 2004 年重庆天原化工总厂氯气泄漏事故。2004 年 4 月 15 日下午，重庆天原化工总厂氯氢分厂的工人在操作中发现，某氯气冷凝器出现穿孔，有氯气泄漏。凌晨 4 时左右，发生局部爆炸，大量氯气向周围弥漫。现场 160 名消防官兵立即进行消防控制。由于附近民居和单位较多，重庆市立即连夜组织人员疏散居民，疏散人数达到 15 万。16 日 17 时 57 分，5 个装有液氯和氯罐在抢险处置过程中突然发生爆炸，造成人员伤亡。此次事故共造成 9 人死亡。

(3) 2004 年齐齐哈尔市氯气泄漏事故。2004 年 1 月 15 日 17 时许，建华区建华乡光明村高头屯发生有毒气体泄漏事故，这次泄漏事故波及地区村镇总人口 2018 人。事发后警察对现场进行了封锁，波及的有关人员全部疏散到安全地带，进行医学检查并跟踪观察 134 人，其中 13 人出现不同程度中毒症状反应，除 1 人因有高血压和慢性支气管炎原发病反应偏重外，这几名留院观察人员经全力救治病情已经平稳，无生命危险。

(4) 2004 年陕西神木县天然气泄漏事故。2004 年 10 月 6 日，神木县神木镇四卜树村发生天然气管道泄漏事故，约有 200 万立方米的天然气泄漏，造成经济损失 600 余万元。天然气泄漏事故的原因是由于装载机司机操作不当，在开挖蓄水池时，弄破

了埋藏在地下的天然气管道；管道巡线人员发现不及时而引起的过失事故。

(5) 2004 年漯河市郾城县液氯泄漏事故。2004 年 12 日晚一辆满载 49t 液氯的气罐车从河南神马集团氯碱化工有限公司出发,沿洛(阳)界(首)公路自西向东行驶。凌晨 1 时左右该车在郾城县新店镇前丁十字路口附近,侧翻路南沟内,造成液氯泄漏。泄漏烟云迅速扩散,大量氯气漫向临近的几个村庄,数万群众的生命财产安全受到严重威胁。泄漏发生 5 个小时内,24200 多名群众安全撤离。

以上事例说明进行重气泄漏安全防范和泄漏后的紧急处理方案研究意义重大,尤其是在工业和经济发展迅速的条件下对重气等有害化工气体的泄漏扩散研究的需要日益紧迫。关于化工有害气体灾害防治的研究中,除了在对化工有害气体的生产、存储以及运输等各个环节加大设备维护、检修和安全设备研发改进等各方面的工作力度以外,灾害预警也是安全防范措施的重要方面。特别是面对灾害的突发性和难以预报的突出问题时,对灾害发生时客观、充分、细致的风险评估以及紧急预案的设置尤为重要。这当中包括危险范围的划定和复杂地形条件对重气云团传播的影响等多方面内容。

重气的扩散行为受到诸多复杂因素影响,并非单一孤立的自然现象。对重气扩散行为广泛和深入研究近年来得到重视。研究重气扩散的方法主要有利用模拟气体进行场地实验、风洞实验以及数学模型的模拟。利用数学模型进行模拟的研究需要对气体扩散行为作充分的机理分析,理论性较强,但由于模型安全、廉价、灵活的特点逐渐被广泛重视。目前计算机技术的迅速发展也为重气扩散数学模型的研究创造了条件。各种研究以重气扩散的不同条件为侧重点分别开展,随着研究的深入,地形和障碍物等的非理想条件下重气扩散、传播研究越发受到重视,当中也不乏强调大气稳定度为影响因素的工作。Steven^[6]等使用流体动力学 CFD (Computational Fluid Dynamics) 模型模拟了罐车液氯泄漏,和氯气烟云在有密集楼宇的城市环境扩散的过程。Steven^[7]使用不同的 CFD 模型模拟城市街道楼宇环境中风场的自然分布以及污染物的扩散问题。Chow^[8]等虚拟了地形起伏情况,并结合大气稳定度情况模拟了 CO₂ 的扩散行为。Scargial^[9]做了重气在真实山地地貌环境下的详尽的扩散模拟研究,并把日夜温度等参数的周期性变化纳入模型当中。除此之外更多的研究者是将模型作为主要分析手段与实验测试相互结合。如 Ohba^[10]和 Gousseau^[12]各自团队以风洞实验为模型测试配合手段分别研究了存在障碍物环境、城市建筑物环境和复杂山区地形环境条件下的重气污染气体的扩散传播过程。同样不乏以场地实验为模拟情境的研究。Sklavounos^[14]等和 Tauseef^[15]等以设置了立方体障碍物 Thorney Island 场地实验为背景研究了不同 CFD 湍流模型的预报表现。Benjamin 等对液化气 CFD 的模拟研究十分细致,模拟并与实验比较了水面上液化气的扩散。Olav^[16]等考虑了液态泄漏物质形成液池并挥发产生污染气体的效应。Michal Kiša^[13]更加全面地考虑到了重气液滴的传播以及气液相之间的传质。另一

方面, Robin 和 Hankin^[17, 18, 32~34]等使用相对 CFD 模型较为简化的浅层模型对考虑了地形的影响重气扩散做出大量研究工作。

1.2 重气扩散主要过程和影响因素

重气一旦发生泄漏一般将经历三个过程。

(1) 源释放。源释放的形态取决于重气的存贮方式。一般分为气相和液相源释放。高压存储的源释放往往伴随喷射, 主要强调的是重气在泄漏口附近高压状态下的喷射过程。

(2) 气云形成。气云的形成过程包括多种可能, 比如高压液相或高压存储的有害重气在喷射进入环境大气时发生相变形成含液滴的气雾过程, 液态物质泄漏形成液池并挥发产生重气气态物质的过程以及直接以气态物质喷射产生气团的过程。

(3) 重气扩散。此过程中环境风场、大气浮力以及重气自身重力是其动力学行为的主要影响因素。

总体上讲, 重气因其相对于空气较大的分子量或混合密度将紧贴地表作爬流运动。这一特征是重气的传输区别于其他类型污染气体传输的主要特征。在传播的初始阶段或者接近泄漏源附近的区域附近这一特征尤为明显。其次, 随着大气卷流的加入, 环境大气逐渐稀释重气导致重气与大气的混合密度不断趋于环境大气, 直到爬流现象不再显著。所以除环境风场的影响外, 可以说爬流和卷流在一定程度上规定了重气的传播形态。更具体地, 重气在扩散中的状态或形态受不同条件的制约, 这些因素可以细分为:

- (1) 重气的形成是否是包含相变过程。
- (2) 是否存在重气液滴。
- (3) 重气是否产生于液态物质的泄漏而导致的挥发。
- (4) 重气受重力作用的爬流。
- (5) 大气风场对重气的输运。
- (6) 大气湍流现象以及大气稳定度对重气传播的影响。
- (7) 障碍物对重气传播的影响。
- (8) 地形对重气传播的影响。
- (9) 因为液体的挥发和气体的凝结伴随发生的热现象。
- (10) 传热过程, 包括地表对气体的传热。

(11) 泄漏源因素, 包括泄漏质量流率, 泄漏持续时间以及泄漏源范围和几何形态。对于不同情形的重气泄漏问题的研究侧重点有所不同, 大部分情形或者重气模型的建立所主要考虑的是重气因重力作用的爬流、大气的携带、地形包括障碍物的影响以及源参量的整合这些重气传播的共同特征和主要方面。从模型的角度上来讲, 关于因素(1)到(3)属于源模型范畴。一般来讲, 重气模型分

成两个部分,即重气的传输扩散模型部分以及源项模型部分。质量、动量和能量的守恒律关系是上述所有内容的最基本物理原理。

特别需要指出的是,地形条件对重气传播扩散有十分显著的影响,在模型理论或实验研究等方面,地形条件常被作为重要的影响因素,而被单独讨论或考察。并且,由于地形的多变性和复杂性,对模型的研究还具有广阔的空间。另外一方面,除了地形如何限制烟羽本身扩散这一客观现象或因素以外,合理地设置围栏或障碍物对污染重气烟羽的扩散限制作用,同样属于复杂地形对扩散现象影响的研究内容,在控制污染物扩散方面有明显的研究意义。

现行的《环境影响评价技术导则—大气环境》(HJ2.2—2008)中指出所谓大气污染物扩散的复杂地形为距离污染源中心点 5km 内的地形高度(不含建筑物)等于或超过排气筒高度时,定义为复杂地形。对于存在多源情况下的建设项目,简单地形与复杂地形的判断可用该项目几何高度最高污染源的高度作为判别标准。

鉴于复杂地形或地貌较宽的内涵范畴,以及其对重气扩散行为影响的研究尚待深入,本书以复杂地形条件为重气扩散重要的影响因素和研究重点。在建立模型及其理论研究方面,以及相关实验研究方面突出地考察山地和存在障碍物条件下的重气扩散行为。

1.3 重气扩散模型评价标准

使用数学模型研究包括重气在内的污染气体的传播扩散,已经成为风险评估研究的重要组成部分和研究工具。安全、可重复并且成本低廉的模型模拟方法对研究危险有害气体的扩散、进行灾害风险评估优势尤为明显。应该讲,数学模型的研究不同于物理或者数学的理论研究,属于工程应用范畴。其相对于基础科学研究具有特殊性。重气扩散问题,往往涵盖丰富内容,而非孤立、单独的简单现象。工程应用问题本身性质决定了其在理论分析方面带有极大的综合性和系统性,其相应的量化分析手段需要整合多种因素,而在应用和推广方面又需要考虑包括程序设计和计算机应用条件在内的许多实际因素。这表明,不可避免地,同一问题的复杂工程模型关于其所应用的目的,和其所强调现象的主要方面有所区别,而并不唯一。模型的设计带有灵活性。这是工程应用模型研究区别于基础研究的主要特点。另一方面,为保证模型的客观性,关于模型研究应存在公共的评价标准和规范。当中需要囊括对模型科学性的估计,和模型的验证等相关限制和内容。并且评价标准的出现利于模型的开发者在基础科学客观背景之上找到应用依据和客观规范,也便于模型使用者依据其应用领域选择模型。

关于重气模型的科学评价标准或协议(protocol),欧洲的 SMEDIS (Scientific Model Evaluation of Dense Gas Dispersion Models) 进行得较早^[19],并且基于此细化衍生出了属于重气分支——液化气的模型评价准则 LNG - MEP (Liquid

Nature Gas Dispersion Model Evaluation Protocol)^[16, 20, 21]。以下总结了此两种重气模型的评价准则所共同具备的内容, 这也是一般模型设计的基本准则。

(1) 科学基础评估。主要包括三个方面, 其一, 模型以及模型假设对其所关注的基本现象背景描述。在对模型的假设做出归纳之前, 模型的设计者尤其需要对其刻画的目标情境做出清晰客观的分析。其二, 科学基础。模型所应主要量化的物理量和决定量的确定, 和主要物理关系以及其他领域概念和关系的使用必须基于广泛公认的科学基础, 模型的设计者应对相关领域科学背景有充分了解。其三, 模型应用的指向以及模型的局限。根据模型所主要考察对象的不同, 和应用目的的差别应对模型的适用范围和局限做出评估。

(2) 模型的确认 (verification)。数学模型的建立到模型的求解之间存在计算机算法实现中间环节。模型确认评价的目标是保证计算机算法的结果不与数学理论和形式相悖逆, 确保算法适定性 (suitability), 旨在对数学模型所选择的算法提出检验。

(3) 模型验证 (validation)。模型验证的一般方法是将模型的结果与实验测量比对, 在允许误差范围内给出模型的验证。实验情境必须与模型所考察的客观基础一致。实验数据可以来自公共数据库和设计实验。应当指出, 实验验证并不能成功证明模型有效, 而只能给出不能证明模型无效的判定。这表示, 在条件允许的情况下, 应采用多套实测结果验证模型。所以模型的验证步骤能够容易地剔除过于粗糙或简化的模型设计, 而对于在科学和数学上设计相对完整模型却难以直接地做出模型无效的判定。

模型的设计需要经历多个步骤, 并非单学科的研究内容, 具有综合性的特点。图 1-1 给出了模型建立的一般步骤框架的宽泛描述^[21]。此框架符合模型设计的一般步骤。对于现象抽象和数学描述的步骤 1 而言, 其中包括了对现象充分的科学分析, 对现象主要方面的筛选, 选择合适的数学手段直到模型建立等步骤。模型求解和实现步骤 2 包括了对算法分析的诸多过程。这表明, 模型的研究是个复杂的系统工程。研究者或研究团队, 除了对相关领域应当具备深厚的科学知识, 也需要具备数学技能和对应用数学诸多领域有详细的了解: 一方面能够对现有的各种数学工具做出评估, 选择适当的数学方法并应用; 另一方面当有必要在对现象重新做出分析时具备理论研究的能力。不仅如此, 模型的算法设计、算法检验以及最后关于模型的实验检测等, 综合了诸多学科应用领域。正因为如此, 在实际操作上模型的综述和比较是基本方法, 并在此基础上研究者易于提出现有模型的改进和发展。

表 1-2 总结了部分重气扩散场地关于重气的主要实验和测试, 其中包括场地实验和风洞实验以及各种测试情境。其中除测试 5、6、8 和 9 之外属于 RE-DIPHEM 数据库^[22], 其余测试属于 LNG-MEP 模型协议^[20], 皆为重气扩散模型公认的检测参考依据。

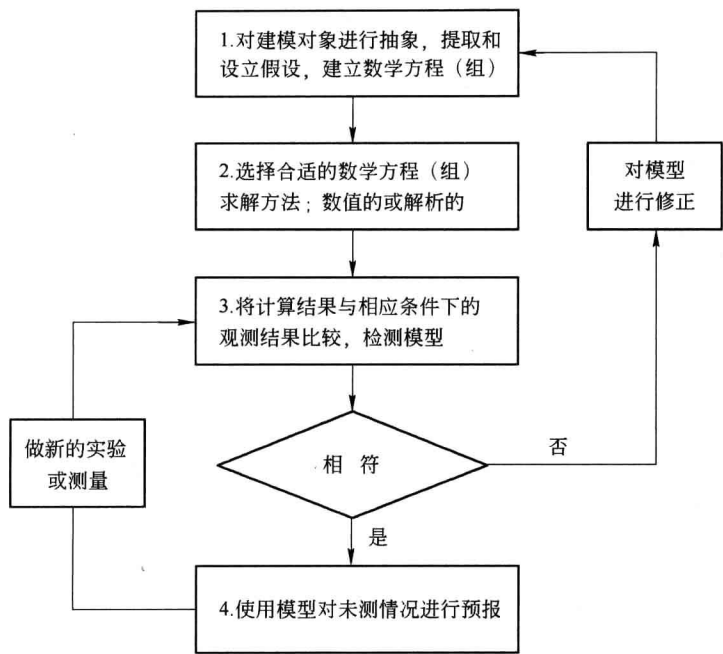


图 1-1 模型设计流程图

表 1-2 部分重气扩散场地或风洞测试概要

编号	名称	测试号	场地(F)或风洞(WT)试验	是否有障碍物	大气稳定度	泄漏物质
1	Maplin Sands, 1980	27	F	无	C-D	LNG
		34			D	
		35			D	
2	Burro, 1980	3	F	无	B	LNG
		7			D	
		8			E	
		9			D	
3	Coyote, 1981	3	F	无	D-C	LNG
		5			C-D	
		6			D	
4	Thorney Island, 1982	45	F	无	E-F	Freon-12-nitrogen
		47			F	

续表 1-2

编号	名 称	测试号	场地(F) 或风洞 (WT) 试验	是否有 障碍物	大气 稳定度	泄漏物质
5	Desert Tortoise, 1983	—	F	无	D	液氨
6	Eagle, 1983	—	F	无		N ₂ O ₄ 释放经化学变化 成为 NO ₂
7	Falcon, 1987	1	F	有	G	LNG
		3			G	
		4			D-E	
8	CEC MTH project BA field experi- ments, 1988 ~ 1989	—	F	无	E-G	丙烷
		—	F	有	E-G	
9	EC Major Technolog- ical Hazards project BA and FLADIS ex- periments, 1991	无障碍	WT	无	D	SF ₆ , 空气与 SF ₆ 混合气体
		障碍		有		
		斜面		有		
10	CHRC, 2006	A	WT	无	D	CO ₂
		B		有	D	
		C		有	D	
11	BA - Hamburg	无障碍 (DA0120)	WT	无	D	SF ₆
		无障碍 (DAT223)		无	D	
		上风围栏 (039051)		有	D	
		上风围栏 (039072)		有	D	
		下风围栏 (DA0501)		有	D	
		下风围栏 (DA0532)		有	D	
		环形围栏 (039094)		有	D	
		环形围栏 (039095)		有	D	
		环形围栏 (039097)		有	D	
		斜面 (DAT631)		无	D	
		斜面 (DAT632)		无	D	
		斜面 (DAT637)		无	D	
		斜面 (DAT647)		无	D	
12	BA - TNO	TUV01	WT	无	D	SF ₆
		TUV02		有	D	
		FLS		无	D	