

动水条件下启动底泥中污染物释放数值模拟

程鹏达¹, 朱心广^{1,2}, 冯春¹, 王晓亮^{3*}

(1 中国科学院力学研究所, 北京, 100190, Email: pdcheng@imech.ac.cn)

(2 中国科学院大学工程科学学院, 北京, 100049)

(3 北京理工大学, 北京, 100081, Email: wangxiaoliang36@bit.edu.cn)

摘要: 环境水动力学中, 湖库底泥污染物释放是人们研究的主要问题之一。本文基于水槽实验研究提供的大量实验数据, 建立上覆水体-启动底泥-污染物的耦合力学模型。在上覆水体不同流速条件下, 数值模拟底泥启动悬浮过程以及污染物释放过程。分析流场特性和污染物浓度分布关系, 得到速度、颗粒体积分数、污染物浓度、湍动能以及时间等参数之间的定量关系。研究表明, 污染物伴随底泥颗粒悬浮释放迅速, 并很快达到平衡。流场特性 (Re) 改变时, 对流和湍流扩散作用在污染物输运过程贡献不同。建立水动力学条件与底泥污染物释放规律的定量化关系, 可为构建湖库区域水污染模型提供支撑。

关键词: 底泥污染物; 流速; 湍动能; 颗粒体积分数; 浓度

1 引言

水体被认为是由水、溶解性物质、悬浮性物质、水生生物和底泥组成的自然综合体¹。污染物质进入水体后会沉积到底泥中并逐渐富集, 使得底泥成为污染物质的蓄积库。在水力条件比较复杂的河口地区, 受污染底泥的内源释放效应越来越明显, 泥沙随水流的运动非常复杂, 具有很大的随机性, 而与泥沙结合的污染物伴随着泥沙在水体中的运动而迁移。一方面, 水体中悬浮泥沙的运动、输移直接影响着污染物时空分布; 另一方面, 污染物随泥沙沉积到底床中, 沉积底泥成为潜在的重要污染“源”或“汇”, 而在一定的水动力扰动和环境条件下会发生“源”、“汇”机制的转换²⁻⁴。水动力作用是影响底泥-水界面污染物扩散迁移的重要物理因素, 动态水流一方面增强了泥水界面附近的扩散和混合能力; 另一方面泥水界面水流的剪应力和紊动强度会导致表层受污染底泥颗粒的再悬浮, 进而造成污染物向上覆水体大量释放。以往底泥污染物释放研究主要集中在湖泊等相对静止的水体当中, 且已有了系统而深入的分析研究。然而针对动水中的底泥污染物释放规律研究较少, 且大多是一些定性的研究, 缺少定量的分析, 容易造成对底泥污染物再悬浮释放的夸大或低估。为了了解水体底泥污染物再悬浮释放的物理过程和影响因素, 本文建立考虑上覆水体-底泥

-污染物的耦合力学模型, 研究不同水动力学条件下, 流速、湍动能与再悬浮泥沙浓度、污染物浓度垂向分布的关系, 得到污染物释放通量与流体流动特性(雷诺数)的关系, 并得到对流和湍流扩散两种作用对上覆水体污染物浓度的影响。

2 数学模型和算法

2.1 控制方程

在上覆水体-底泥-污染物模型中, 悬浮底泥被视为一种悬浮液, 基于大量实验数据分析^{5-7]}, 该类悬浮液黏度可以表示为颗粒体积分数的函数。因此, 认为该类悬浮液(流体-颗粒)具有宏观性质(例如密度和黏度)的单一流动连续体。模型假设如下: ①每相的密度大致恒定。②共享相同的压力场。③与宏观流动的时间尺度相比, 颗粒弛豫时间较短。悬浮液的密度和黏度分别由下式给出:

$$\rho = (1 - \varphi)\rho_1 + \varphi\rho_2; \quad \mu = (1 - \varphi)\mu_1 + \varphi\mu_2 \quad (1)$$

式中, ρ_1 , ρ_2 和 μ_1, μ_2 分别是流体和颗粒的密度和黏度, φ 是颗粒的体积分数。

考虑到悬浮液可以作为连续介质处理, 流场由不可压缩质量和动量守恒方程控制。

$$\nabla \cdot (\rho u) = 0; \quad \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho g \quad (2)$$

式中, u 是速度, ρ 是悬浮液密度, t 是时间, p 是压力, τ 是黏性应力和雷诺应力总和, g 是重力加速度。 $\tau = \mu \gamma$, 其中 μ 是悬浮液黏度, $\gamma = \nabla u + \nabla u^T$ 。为了使控制方程封闭, 本文采用 $k-\varepsilon$ 双方程湍流模型, $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\varepsilon = 1.3$, $C_{\varepsilon 1} = 1.44$, $C_{\varepsilon 2} = 1.92$ 。

底泥颗粒的输运方程由下式决定:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \cdot \nabla \varphi = -\nabla \cdot N_\varphi \quad (3)$$

式中, N_φ 是粒子的总扩散通量。

污染物浓度的输运方程由下式决定:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \nabla c = -\nabla \cdot N + R \quad (4)$$

式中, c 是相对浓度, 为无量纲参数, N 是浓度的总扩散通量, R 是源和汇项。

底泥颗粒悬浮液的黏度通常写为颗粒体积分数的函数^{7-12]}。本文采用 MPQ 模型^[9-10]。

$$\mu = \mu_1 \left(1 - \frac{\varphi}{\varphi_m} \right)^{-2} \quad (5)$$

式中, φ_m 是固相颗粒最大填充浓度, 取值为 0.62。

2.2 几何模型、力学参数、边界条件和初始条件

在前期实验中,水槽宽为 0.25 m,水深为 0.1 m,底泥深度为 0.08 m。数值模拟中使用的几何模型与实验尺寸一致如图 1,并将上覆水体-底泥界面的左侧设置为坐标原点。在数值模拟中,上覆水和底泥的密度分别为 997 kg/m^3 和 2650 kg/m^3 。上覆水的黏度设定为 $1 \times 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ 。底泥颗粒粒径 (D_{50}) 为 0.03mm,含水量为 57.5%。

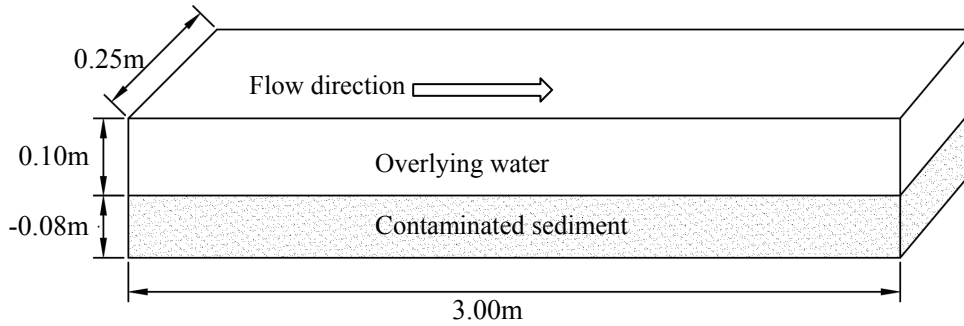


图 1 几何模型

2.3 边界条件和初始条件

假设水槽壁面为无滑移边界,顶部表面为对称边界。污染物浓度场计算中,水槽壁面和顶面设置为无通量边界条件。左右边界采用周期性边界条件,即等速度,等污染物浓度,等颗粒体积分数,相等的湍流动能和相等的湍流耗散率。对于初始条件,初始压力设定为与重力相关,初始速度设定为 0。污染底泥中颗粒体积分数设定为 42.5%,上覆水体中颗粒体积分数为 0。污染底泥中污染物相对浓度为 1,上覆水体中相对浓度设定为 0。

3 结果和讨论

在本文采用标准 Galerkin 有限元离散化方法求解流场和污染物浓度场¹³,特别是,动量和湍流输运方程采用标准 Galerkin 离散化可能导致解的振荡。因此,需要某种迎风格式来抑制这些非物理振荡,本文采用 Hughes 等^[14-15]提出的 Galerkin 最小二乘法。数值计算采用 82800 个单元的结构化网格,该网格是在一系列网格独立性测试之后选择的。

底泥颗粒随水流的运动非常复杂,具有很大的随机性,为了定量分析,我们引入平均速度、平均体积分数、相对平均浓度和平均湍流动能的概念如下:

$$C = \frac{\int_0^{\infty} u c d s}{UH}; \quad \Phi = \frac{\int_0^{\infty} u \phi d s}{UH}; \quad U = \frac{\int_0^{\infty} u^2 d s}{\int_0^{\infty} u d z}; \quad K = \frac{\int_0^{\infty} u k d s}{UH}; \quad (6)$$

式中, C 为相对平均浓度,为无量纲值, U 为平均速度(单位: m/s), K 为平均湍动能(m^2/s^2), Φ 为平均体积分数, u 为流场速度(单位: m/s), k 为湍流动能 (m^2/s^2)。

选取几何模型中上覆水体中心垂面作为研究对象，底泥起动过程中上覆水体平均速度随时间的变化如图 2 所示。其中 Case1-6 中平均速度分别为 0.03m/s, 0.08 m/s, 0.13 m/s, 0.23 m/s, 0.35 m/s 和 0.50 m/s。底泥起动初期，不同工况的水体平均速度均很小，随时间增加，水体平均速度迅速增加并在短时间内达到稳定。

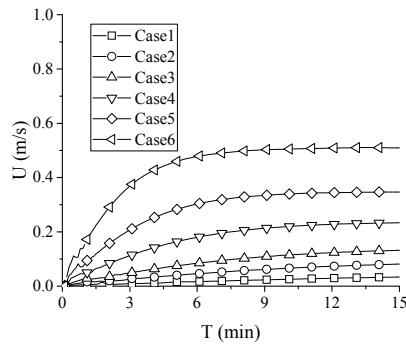


图 2 底泥起动过程中速度随时间变化

选取Case3和Case4数据，分析不同时间底泥颗粒体积分数在垂直方向的分布，如图3。底泥再悬浮初期，不同流速条件下的颗粒体积分数均分布相似。随着时间增加，流速越快上覆水体中颗粒体积分数迅速增加，并均在2分钟内达到同一个稳定值，这与实验现象一致。泥沙垂向浓度的分布因其性质不同其物理过程也不一样。对于细颗粒底泥 ($D_{50}=0.03\text{mm}$)，其空间结构分布均匀，颗粒向上的悬浮和向下的沉降运动之间的平衡导致了颗粒体积分数分布的平衡。当水动力条件恒定时，这种平衡不会打破。考虑细颗粒泥沙的沉降速度是体积分数的函数，与粗颗粒泥沙相比，沉降较小，因此颗粒体积分数沿水深分布更加均匀。

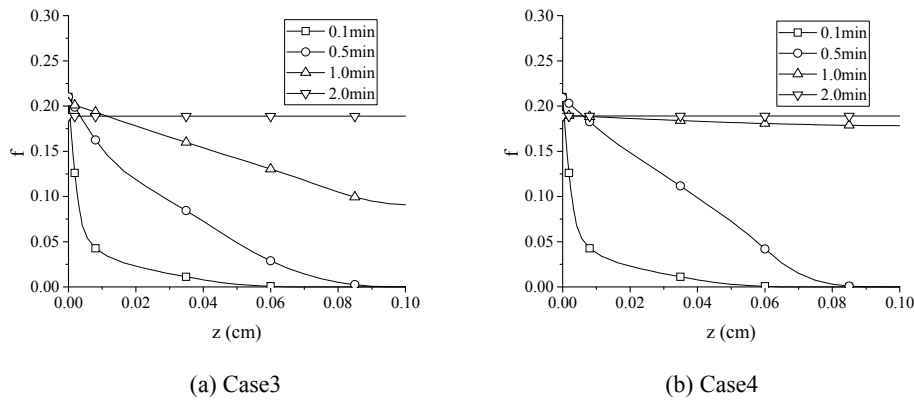


图 3 不同时间上覆水体颗粒体积分数垂向分布

迅速进入上覆水体的底泥颗粒，对上覆水体流动特性有影响，进而影响到污染物的释放。选取Case1、Case3、Case4和Case5的数据，分析不同流速时，平均湍动能和污染物相对平均浓度与时间的关系。由于细颗粒泥沙沉降速度较小，进入上覆水体后，颗粒体积分数很快达到平衡，并保持稳定。存在于细颗粒泥沙孔隙水中的污染物也迅速进入到上覆水

体，并很快达到同一个平衡浓度。值得注意的是，平均湍动能在底泥细颗粒泥沙起动后达到峰值，然后迅速降低，并随时间逐渐达到稳定。流速增加，湍动能随之增加，上覆水体中污染物达到平衡的时间也越短。上覆水体污染物达到平衡的过程中，对流作用和湍流扩散作用分别做出了各自的贡献。

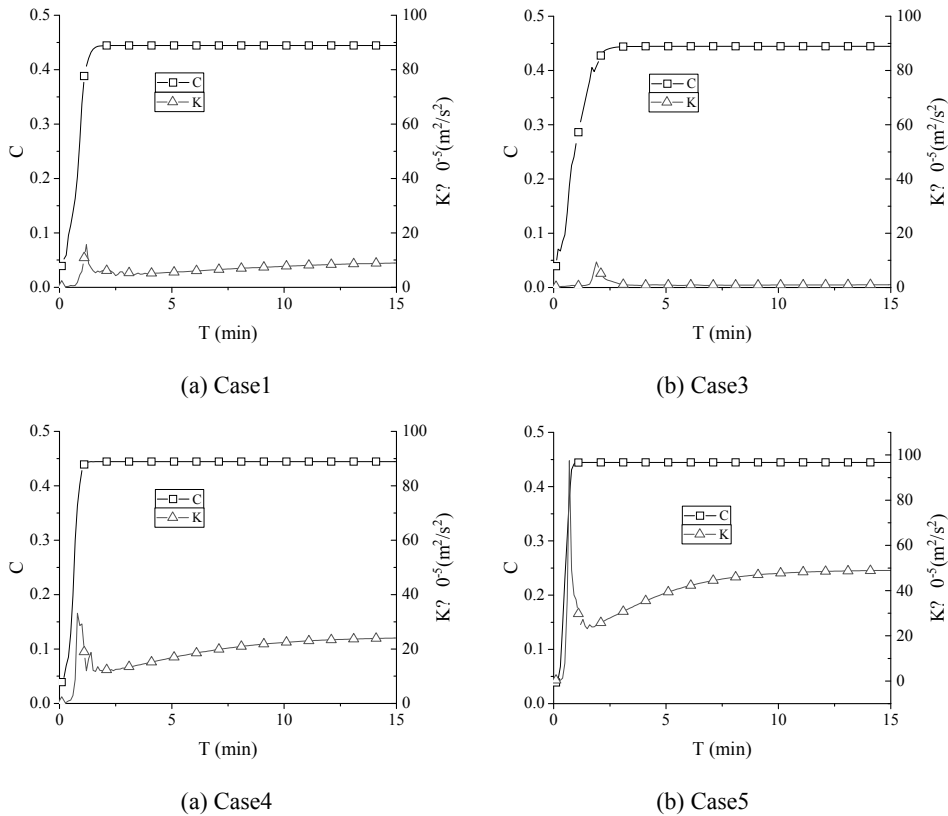


图4 相对平均浓度-湍动能-时间关系曲线

在不考虑污染物与底泥细颗粒泥沙的吸附解吸作用时，对流作用和湍流扩散作用均对上覆水体污染物达到平衡的过程有影响。分析上覆水体污染物达到平衡过程中，扩散通量 N （总通量 N_T ，对流通量 N_C ，湍流扩散通量 N_D ）与水流特性（雷诺数 Re ）之间的关系如图5。对于非吸附介质，污染物总扩散通量随流速线性增加，也即随着雷诺数线性增加。当雷诺数较小时（ $0 < Re < 35000$ ），污染物扩散过程中，对流和湍流扩散贡献基本一致。当雷诺数较大时（ $Re > 35000$ ），湍流扩散贡献迅速下降，污染物扩散主要由对流作用主导。

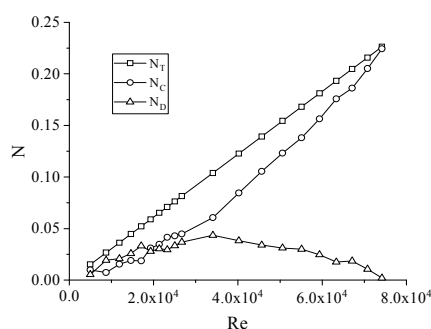


图5 污染物释放通量与雷诺数关系曲线

4 结论

底泥污染物再悬浮释放过程，是由上覆水体-底泥-污染物构成的相互耦合过程，底泥起动后复杂的流场特性是底泥再悬浮释放污染物的主要影响因素。细颗粒底泥易受到水流作用的影响，由于其空间结构相对均匀，沉降速度较小，再悬浮时上覆水体中泥沙颗粒在很短时间内 ($<2\text{min}$) 就能达到平衡，并保持稳定。迅速进入上覆水体的底泥颗粒，影响了上覆水体流动特性，进而影响到污染物的释放。平均湍动能在底泥细颗粒泥沙起动后达到峰值，然后迅速降低，并随时间逐渐达到稳定。流速增加，湍动能随之增加，上覆水体中污染物达到平衡的时间也越短。对流作用和湍流扩散作用均对上覆水体污染物达到平衡的过程有影响。对于非吸附介质，当雷诺数较小时 ($0 < Re < 35000$)，污染物扩散过程中对流和湍流扩散贡献基本一致。当雷诺数较大时 ($Re > 35000$)，湍流扩散贡献迅速下降，污染物扩散主要由对流作用主导。

致谢

本研究得到了自然科学基金 (11602278、11432015、11802313) 和“北京理工大学青年教师学术启动计划”的支持，在此表示感谢。

参考文献

- 1 Zhang C, Yu Z G, Zeng G M, et al. Effects of sediment geochemical properties on heavy metal bioavailability.[J]. Environment International, 2014, 73(4):270-281.
- 2 CHENG Pengda, ZHU Hongwei, FAN Jingyu, FEI Minrui, WANG Daozeng. Numerical Research for Contaminant Release from Un-suspended Bottom Sediment under Different Hydrodynamic Conditions [J]. Journal of Hydrodynamics, 2013, 25(4):620-627
- 3 CHENG Pengda, Zhu Hong-wei, Zhong Bao-chang, Fei Minrui, Wang Dao-zeng. Sediment rarefaction resuspension and contaminant release under tidal currents[J]. Journal of ydrodynamics, 2014, 26(5):827-834.
- 4 Zhu H W, Cheng P D*, Li W, et al. Empirical model for estimating vertical concentration profiles of re-suspended, sediment-associated contaminants[J]. Acta Mechanica Sinica, 2017, 33(5): 846-854.
- 5 王兆印, 钱宁. 高浓度泥沙悬浮液物理特性的实验研究[J]. 水利学报, 1984(4):3-12.
- 6 J.J. Stickel, R.L. Powell, Fluid mechanics and rheology of dense suspensions [J]. Annual Review of Fluid

- Mechanics, 2005, 37(1):129-149.
- 7 E.J. Hinch , The measurement of suspension rheology[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2011, 686:1-4.
 - 8 I.M. Krieger , T.J. Dougherty , A mechanism for non-Newtonian flow in suspensions of rigid spheres [J]. Transaction of the Society of Rheology, 1959,3:137-152.
 - 9 Maron S H , Pierce P E . Application of ree-eyring generalized flow theory to suspensions of spherical particles[J]. Journal of Colloid Science, 1956, 11(1):80-95.
 - 10 Quemada D . Rheology of concentrated disperse systems and minimum energy dissipation principle[J]. Rheologica Acta, 1977, 16(1):82-94.
 - 11 Mendoza C I , Santamari A-Holek I . The rheology of hard sphere suspensions at arbitrary volume fractions: An improved differential viscosity model[J]. The Journal of Chemical Physics, 2009, 130(4):044904.
 - 12 Shewan H M , Stokes J R . Analytically Predicting the Viscosity of Hard Sphere Suspensions from the Particle Size Distribution[J]. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2015, 222:72-81.
 - 13 Ignat L , Pelletier D , Ilinca F . A universal formulation of two-equation models for adaptive computation of turbulent flows[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2000, 189(4):1119-1139.
 - 14 Franca L P , Sérgio L. Frey. Stabilized finite element methods: II. The incompressible Navier-Stokes equations[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1992, 99(2-3):209-233.
 - 15 Hughes T J R , Franca L P , Hulbert G M . A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VIII. The galerkin/least-squares method for advective-diffusive equations[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1989, 73(2):173-189.

Numerical simulation of pollutant release during sediment starting in dynamic water environment

CHENG Peng-da¹, ZHU Xin-guang^{1,2}, FENG Chun¹, WANG Xiao-liang^{3*}

(1 Institute of Mechanics Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100190, pdcheng@imech.ac.cn)

(2 University of Chinese Academy of sciences, Beijing 100049, China)

(3 Beijing Institute of Technology, Beijing, 100081, wangxiaoliang36@bit.edu.cn)

Abstract: In environmental hydrodynamics, the release of pollutants from sediments is one of the main problems. Based on a large number of experimental data provided by water channel experiments, a coupled mechanical model of overlying water body, sediment and pollutants is established in this paper. The process of sediment starting and pollutant release are numerically simulated under different velocity conditions of overlying water. The quantitative relationships among velocity, particle volume fraction, pollutant concentration, turbulent kinetic energy and time are obtained by analyzing the relationship between flow field characteristics and pollutant concentration distribution. The results show that contaminants are released rapidly with the suspension of sediment particles and quickly reach equilibrium concentrations. When the flow field characteristics (Re) change, the contribution of convection and turbulent diffusion to pollutant release process is different. Establishing a quantitative relationship between hydrodynamic conditions and pollutant release can provide support for constructing water pollution model in Lake and reservoir areas.

Key words: Sediment pollutants; Velocity; Turbulence kinetic energy; Particle volume fraction; Concentration;