

挥发性污染物水气耦合扩散数值模拟

陈丽萍, 蒋军成

(南京工业大学 城市建设与安全工程学院, 南京 210009)

摘要:挥发性污染物泄漏进入天然水体造成水污染, 因其挥发又造成空气污染。为反映水污染与空气污染的耦合影响, 以压缩型 VOF 算法为基础, 根据挥发作用中的双膜理论, 利用无量纲亨利常数, 建立挥发性污染物水气耦合扩散模型。利用基于非结构网格的高分辨率有界格式, 对三氯乙烯和三溴乙烯点源泄漏造成的水、空气污染实现耦合模拟, 模拟结果比单相模型计算结果更接近实验值。分析了环境温度和风速对不同无量纲亨利常数污染物在气液交界面上传质过程的影响。

关键词:污染; 耦合扩散; 模拟; 有界格式

中图分类号: X131; TV131.2 **文献标志码:** A **文章编号:** 1674-4764(2010)05-0102-07

Coupling Diffusion Simulation of Volatile Pollutant in the Water and Air

CHEN Li-ping, JIANG Jun-cheng

(College of Urban Construction and Safety Engineering, Nanjing Industrial University, Nanjing, 210009, P. R. China)

Abstract: Spill of volatile poisons into natural water bodies causes water pollution and then air pollution arises from water pollution because of volatilization. In order to explain the coupling of water pollution and air pollution, the dimensionless Henry constant of volatile poisons was used to establish coupling diffusion model based on compressed VOF method and the double-film theory explained for volatilization. A high resolution bounded differencing scheme for arbitrarily unstructured meshes was applied to simulate coupling diffusion of trichloroethylene and tribromoethylene. The simulation results are in good agreement with those from single-phase model. The influence of environmental temperature, wind velocity and the dimensionless Henry constant on the mass transfer across gas-liquid interface was analysed.

Key words: pollution, coupling diffusion, simulation, bounded scheme

挥发性污染物泄漏进入天然水体造成水污染, 因其挥发作用又造成空气污染。严重情况下, 由此造成的水气污染演变为环境灾害, 危害公共安全, 因此准确预测泄漏后挥发性污染物在水体和大气中的时空分布有重要意义。挥发性污染物在气液交界面的挥发传质过程与水体和空气中的污染物浓度相关, 所以水体和空气中的污染物浓度是相互耦合的。已往都用单相模型研究挥发性污染物扩散, 即污染

物气液相是独立建模的, 气液交界面传质属边界条件。气液交界面传质研究中, Wesely^[1], Moog^[2] 假设空气中污染物浓度为零, 这样的假设统称为单相单阻力模型, 即污染物由液相挥发变为气相后, 瞬时无限扩散, 气相扩散无阻力, 仅有液相扩散阻力。显然单相单阻力模型使得挥发性污染物水气耦合作用体现不出来。Bade^[3] 和 Hardt^[4] 提出单相双阻力模型, 认为污染物挥发时气液相各存在一阻力。

收稿日期: 2010-01-11

基金项目: 国家“十一五”科技支撑计划课题资助(2006BAK01B02-03); 南京工业大学学科基金资助(39714004)

作者简介: 陈丽萍(1971-), 女, 博士, 副教授, 主要从事环境工程研究, (E-mail) clpjoy@njat.edu.cn.

Fan^[5-6]建立单相三阻力模型,该模型除气液相各存在一阻力外,气液交界面上还假设有一准层流阻力。上述的单相模型中气液相阻力是分开建立的,即气液相阻力仅与各自传质系数成反比,并假设气相和液相传质系数之间无关联。可见单相模型不能反映挥发性污染物水气耦合作用。此外,污染物在天然水体中因各向湍流扩散系数差别大而属各向异性扩散,但在空气中扩散属各向同性扩散^[7-8]。所以,从扩散的性质讲,挥发性污染物在水气中的扩散是有界的。

两相流中VOF方法是应用广泛的界面流数值方法^[9-10],其实现了水气同时计算,因此满足挥发性污染物水气耦合扩散求解的要求。Caboussat^[11]和Dolbow^[12]通过反复地界面重构实现VOF算法,界面重构的VOF算法计算效率低下。

常规的离散格式不能很好地用于界面流,是因为低阶的离散格式造成界面附近严重的假扩散,锋利的界面被抹平;高阶离散格式又会造成非物理振荡。Leonard^[13]最初提出了变量归一化(normalised variable diagram, NVD)的有界离散格式。此后STOIC等NVD型有界格式都是在不同的差分格式之间进行切换,易造成求解不稳定^[14]。HPLA和CLAM格式应用了逐渐切换函数以避免求解的不稳定。但HPLA和CLAM格式仅适合结构网格上^[15]。Jasak等^[16]人提出了建立在非结构网格上的NVD型高阶Gamma有界格式,该格式是基于物理量梯度的归一化方法,采用了一阶迎风差分 and 中心差分之间光滑过渡。

论文引入人工压缩项,构造出压缩型VOF算法。据此,再由挥发作用的双膜理论^[7],利用无量纲亨利常数建立挥发性污染物水气耦合扩散模型,实现挥发性污染物水气扩散同时求解。压缩型VOF算法结合Gamma有界离散格式,可以自动处理界面的拓扑演化,无需界面重构,提高计算效率^[17]。该文数值模拟挥发性污染物三氯乙烯和三溴乙烯点源泄漏后的水气耦合扩散过程,将模拟结果与实验比较,得到挥发性污染物泄漏后在水体和空气中耦合扩散过程的规律。

1 压缩型VOF算法构造

1.1 水体VOF压缩型模型

VOF的基本原理是通过研究网格单元中液体和网格体积比函数 α 来构造和追踪气液交界面。若 $\alpha=1$,说明该单元为液体;若 $\alpha=0$,则该单元为气体;当 $0<\alpha<1$ 时,该单元为气液交界面。令 $\beta=$

$1-\alpha$,网格单元的密度、黏度和速度等场量都表示为液体和气体的体积加权平均,如网格单元流速 u_i 如下:

$$u_i = \alpha u_{\alpha_i} + \beta u_{\beta_i} = \alpha u_{\alpha_i} + (1-\alpha)u_{\beta_i} \quad (1)$$

式中 u_{α_i} 、 u_{β_i} 为液体、气体流速m/s, α 网格单元中液体与网格体积之比, β 网格单元中气体和网格体积之比。

基于流体属性的表达,界面流可利用单场方程描述。网格单元连续性方程和动量方程分别如下:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial \tau} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_i \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho f_i \quad (3)$$

式中: ρ 为密度 kg/m^3 ; p 为压强,Pa; μ_i 为湍流粘性系数, kg/ms ; f_i 为质量力, N/m^3 。

α 的尖锐性和有界性的特征在离散时很难得到保留。为解决此问题,许多研究者采用界面实时重构,精确计算界面附近流体进出,得出合理的界面。界面实时重构使得计算效率低下。该文摒弃界面重构,导出体积比函数 α 压缩型方程。具体做法是由质量守恒定律得出网格单元内 α 、 β 的变化率:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} + \frac{\partial u_{\alpha_i} \alpha}{\partial x_i} = 0, \quad \frac{\partial \beta}{\partial \tau} + \frac{\partial u_{\beta_i} \beta}{\partial x_i} = 0 \quad (4)$$

将式(1)代入式(4)得出体积比函数 α 的压缩型微分方程:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} + \frac{\partial (u_i \alpha)}{\partial x_i} + \frac{\partial ((u_{\alpha_i} - u_{\beta_i})(1-\alpha)\alpha)}{\partial x_i} = 0 \quad (5)$$

方程第3项称为压缩项,反映了气液交界面上气液相对速度对气液交界面的影响。压缩项只在界面附近过渡区域起作用, $\alpha=1$ 和 $\alpha=0$ 的单相区域内不起作用。方程式(5)有一重要特征,其解自动满足 $0<\alpha<1$ 有界性。

1.2 挥发性污染物耦合扩散压缩型模型

挥发作用的双膜理论通常用来解释气液传质过程。该理论假设物质由液相向气相挥发过程中要通过气液界面上的一个薄“液膜”和一个薄“气膜”组成的界面,即克服气液膜两阻力,而物质在此界面上的变化是达到瞬时气液平衡,这一平衡遵循亨利定律^[7]。由亨利定律表达式知污染物在气相中的浓度 C_β 与液相中的浓度 C_α 之比为无量纲亨利常数 H_{aw} ,即 $H_{aw} = C_\beta/C_\alpha$ 。 H_{aw} 是物质与其分子结构和环境温度有关的物性参数,可从相关化学手册查得。可见文中的耦合模型是建立在双阻力基础上,通过无量纲

亨利常数耦合气液相浓度的。影响挥发传质过程的因素有污染物的蒸汽压,但一定温度下,蒸汽压与气相浓度一一对应,成正比关系。也就是说蒸汽压不是独立于无量纲亨利常数的另一影响因素,蒸汽压对挥发传质的影响可归为无量纲亨利常数的影响。此外,环境温度也是通过无量纲亨利常数影响挥发传质的,故将无量纲亨利常数作为重要影响因素进行研究。

网格单元污染物总浓度表示为液体和气体的体积加权平均,再根据 H_{aw} ,得到 C_α 、 C_β 与网格单元总浓度 C 的关系:

$$\begin{aligned} C_\alpha &= \frac{1}{\alpha + (1-\alpha)H_{aw}} C, \\ C_\beta &= \frac{H_{aw}}{\alpha + (1-\alpha)H_{aw}} C \end{aligned} \quad (6)$$

式中 C_β 、 C_α 和 C 浓度 kg/m^3 。

由质量守恒定律得污染物在水、空气中单相迁移方程分别为式(7)和式(8):

$$\frac{\partial(\alpha C_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial(u_i \alpha C_\alpha)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(E_i \frac{\partial(\alpha C_\alpha)}{\partial x_i} \right) + k_a \alpha C_\alpha \quad (7)$$

$$\frac{\partial(\beta C_\beta)}{\partial t} + \frac{\partial(u_i \beta C_\beta)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial(\beta C_\beta)}{\partial x_i} \right) + k_\beta \beta C_\beta \quad (8)$$

式中 u_i 为网格单元总速度, m/s ; E_i 、 D 分别为污染物在水、空气中湍流质扩散系数, m^2/s ; k_a 、 k_β 为污染物一级反应动力学系数, $1/\text{s}$ 。

式(7)、(8)相加,并将式(6)代入,整理后得出污染物的水气迁移耦合扩散模型:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(u_i C)}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(u_{\alpha_i} - u_{\beta_i}) \alpha (1-\alpha) \frac{1-H_{aw}}{\alpha + (1-\alpha)H_{aw}} C \right] \\ = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_i} \left[\frac{E_i \alpha + (1-\alpha)H_{aw} D}{\alpha + (1-\alpha)H_{aw}} C \right] + \frac{\alpha k_a + (1-\alpha)k_\beta H_{aw}}{\alpha + (1-\alpha)H_{aw}} C \end{aligned} \quad (9)$$

等号左边第 3 项是挥发性污染物在气液交界面的交换量。水中 $\alpha = 1$, 式(9)与式(7)一致; 空气中 $\alpha = 0$, 式(9)变为式(8)。因此挥发性污染物在水体、空气及气液交界面的迁移过程可用式(9)统一描述。

2 方程离散

2.1 Gamma 格式

湍流计算采用 κ - ϵ 模型, 数值离散用有限体积

法(FVM), 采用交错网格, 速度压力耦合用 PISO 算法, 时间差分采用 Crank-Nicholson 格式, 离散方程组的求解用 ADI 法, 先求解方程式(2)、(3)、(5), 得出水气动力学参数后, 再解方程式(9)。

界面流对离散格式要求高, 不满足有界性的离散会产生严重的界面耗散和非物理振荡。该文采用 Gamma 离散格式以保证迁移扩散中物理量的有界性。以一维流动为例说明 Gamma 格式的思想, 如图 1 中网格节点。

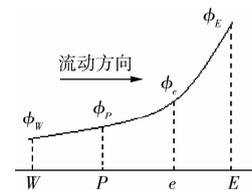


图 1 网格节点

由 e 面上流通量的方向确定 Donor 和 Acceptor 网格单元, 物理量 φ 的归一化过程^[13]如下:

$$\tilde{\varphi}_P = 1 - \frac{\varphi_E - \varphi_P}{2(\nabla \varphi)_P \cdot \mathbf{d}} \quad (10)$$

式中 \mathbf{d} 为 Donor 与 Acceptor 网格单元间的距离矢量。

Gamma 差分格式中, 界面上物理量 φ_e 取值:

当 $\tilde{\varphi}_P \leq 0$ 或 $\tilde{\varphi}_P \geq 1$, $\varphi_e = \varphi_P$

当 $\beta_m \leq \tilde{\varphi}_P < 1$, $\varphi_e = f_e \varphi_P + (1-f_e) \varphi_E$

当 $0 < \tilde{\varphi}_P < \beta_m$, $\varphi_e = [1 - \gamma(1-f_e)] \varphi_P + \gamma(1-f_e) \varphi_E$

其中 $\gamma = \frac{\tilde{\varphi}_P}{\beta_m}$, $f_e = \overline{eE} / \overline{PE}$, β_m 是常数, 通常

$0.1 \leq \beta_m \leq 0.5$ 。

2.2 压缩项相对速度的处理

方程式(5)和式(9)的压缩项上存在气液相对速度, 用体积比函数 α 的单位梯度定义水气交界面法线方向 n_i , 数值求解时相对速度 $(u_{\alpha_i} - u_{\beta_i})$ 在 n_i 方向的通量 F_n 的如下:

$$F_n = f_b \cdot n_i s_i \quad (11)$$

式中 f_b 称为约束通量, 以保证 F_n 有界, $f_b = \min(\alpha f_u, \max(f_u))$ 。 f_u 是 u_i 在控制容积表面 s_i 上的单位面积通量, 即 $f_u = \frac{u_i s_i}{|s_i|}$ 。

3 模型验证

3.1 物理模型与计算模型

为验证压缩性挥发性污染物水气耦合扩散模型的正确性, 对三氯乙烯(C_2HCl_3)点源泄漏进行数值模拟和实验验证。实验水槽长 14.0 m, 宽 0.4 m, 深

0.4 m,底坡为3/700,均匀流处水深0.087 m,水流方向为 x 方向,水槽宽度为 y 方向。 z 方向垂直向上。为消除水槽进出口水流的影响,仅水槽中部作为实验观察段,坐标原点设在水槽中部且岸边处,水槽底部 $z=0$ 。水中湍流扩散系数的计算参考文献[18],空气中湍流质扩散系数 $D = \nu_t / Sc_a$, ν_t , Sc_a 为湍流运动粘性系数和 Schmidt 数。实验在密闭的室内进行,因此室内风速可忽略。模拟计算域水槽部分 $5\text{ m} \times 0.4\text{ m} \times 0.4\text{ m}$,空气部分 $5\text{ m} \times 3\text{ m} \times 10\text{ m}$ 。网格为结构非均匀网格,自由水面附近区域对网格加密。进口边界划分为水流速度进口和空气速度进口,进口的 k, ϵ 由经验公式给出。假设出口断面为充分发展的湍流,所有物理量一阶法向梯度为零。50 mL浓度为2 g/L的三氯乙烯溶液在 $x=0$, $y=0.16\text{ m}$ 处分别瞬时泄漏。取样断面 x 值分别为1.00 m、1.41 m、1.63 m、2.21 m和2.48 m处。根据文中建立的污染物的水气迁移耦合扩散模型,文中重点研究的是三氯乙烯点源泄漏后三维水气耦合扩散过程。而2.48 m横断面后,水中三氯乙烯溶液横向扩散完毕,只有简单的纵向一维扩散,故2.48 m横断面后不再取样。

为确定水气采样点的位置,自行设计了图2所示的叉形采样定位器。

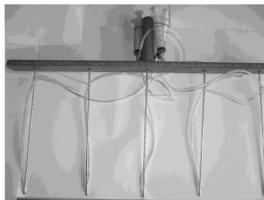


图2 采样定位器

定位器的横梁和各叉支均标有刻度。采集水样时将注射器固定于采样定位器叉支相关位置,进行同一断面多点同时取样,隔一段时间再用预先准备好的同样取样装置进行取样。取样断面变化时,在同样的水力条件下,再次投放50 mL浓度为2 g/L的三氯乙烯溶液,重复上述取样过程。气体采样中将多孔玻板吸收管固定于采样定位器。采用气相色谱法测定水样中的三氯乙烯,其原理是:在密闭的顶空瓶中,三氯乙烯分子从液相逸入到液面上部空间的其体重,在一定温度条件下,三氯乙烯分子在气液两相之间达到动态平衡,此时三氯乙烯在气相中的浓度和它在液相中的浓度成正比,通过对气相中三氯乙烯浓度的测定,即可计算出水样中三氯乙烯的质量浓度。气样用吡啶-碱比色法测定三氯乙烯浓

度,原理是三氯乙烯与吡啶和碱反应生成红色,比色定量。吡啶作为吸收剂,串联两个各装10 mL吸收液的多孔玻板吸收管,置冰盐浴中,用抽气机抽气。采样后,用吸收管中的吸收液洗涤进气管内壁3次,由每个吸收管中各量取5.0 mL样品溶液,分别放入比色管中,供测定用。配制三氯乙烯标准液:于25 mL量瓶中加入10 mL吸收液,准确称量,加1~2滴三氯乙烯,再准确称量。2次称量之差即为三氯乙烯的质量,加吸收液至刻度,计算1 mL溶液中三氯乙烯的含量。再用吸收液稀释得三氯乙烯的标准溶液。标准管的配制:向标准管中各加入1 mL氢氧化钠溶液(10 g/L)混匀,在70℃水浴中加热3 min,取出加3 mL水,混匀,3 min后目视比色定量。按标准管配制的操作条件,将处理后的样品与标准管目视比色,求出三氯乙烯含量。

3.2 模拟与实验分析

3.2.1 计算效率比较 对上述物理模型,该文用压缩VOF计算比较Caboussat的三点界面重构、Dolbow的X-FEM界面重构和Gamma算法。所用的微机为双核Intel Pentium 4 CPU 3.00 GHz,计算节点数125 223,表1列出计算流动1 s时计算机的耗时。可见Gamma算法省时,比三点界面重构和X-FEM界面重构计算效率高15.4%和13.3%。

表1 计算效率比较

| 算法 | 三点界面重构 | X-FEM界面重构 | Gamma |
|------|--------|-----------|-------|
| 耗时/s | 732 | 714 | 619 |

3.2.2 模型比较 图3是忽略风速,水流平均流速9.35 cm/s,环境温度25℃,泄漏后20 s时, $x=1.63\text{ m}$ 断面上三氯乙烯浓度分布图。其中图(a)是应用耦合模型模拟所得等值线,气液相浓度场同时得到计算。而单相模型则无法实现气液相浓度场同时计算。由图(a)可见水中垂向三氯乙烯浓度已达到均匀一致,而空气中垂向浓度差别大。 y 值相同时,离液面越远,三氯乙烯浓度越低。由于泄漏点偏离水槽轴线,受水槽侧壁影响,浓度中心两侧浓度等值线疏密不均。图(b)是该断面上高0.1 m处气体浓度实验、该文耦合模型计算及单相单阻力、单相双阻力、单相三阻力模型计算的比较。图(b)中耦合模型计算的结果与实验值较吻合。而单相单阻力模型认为空气中污染物浓度为零,与实验值有较大差别。单相双阻力和单相三阻力模型虽优于单阻力模型,但也不能较好地反映气体浓度空间分布的特性,是因为单相双阻力和单相三阻力模型忽略了气相浓度的梯度,故计算结果仅成直线。

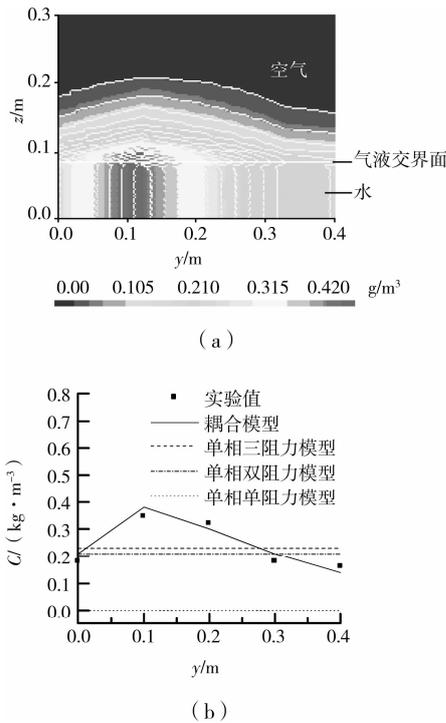


图 3 三氯乙烯横向浓度分布

取样点 $x=1.63\text{ m}$, $y=0.16\text{ m}$, $z=0.07\text{ m}$, 耦合模型及单相单阻力、单相双阻力、单相三阻力模型计算所得的水体中三氯乙烯浓度与实验值的比较显示于图 4。 C/C_0 为三氯乙烯浓度与投放浓度之比。图中可见, 对于固定位置, 随浓度中心的到来, 水中三氯乙烯浓度从零升至峰值后又迅速下降。实验和模型计算都反映了这一特性, 与单相单阻力、单相双阻力、单相三阻力模型相比, 该文耦合模型更接近实验值。单相单阻力模型计算结果低于实验值, 是因为气体浓度为零的假设加剧了挥发传质过程, 使得单相单阻力模型计算得到的水中污染物浓度较实际情况偏低。单相双阻力、三阻力模型用于液相浓度计算的误差小于用于气相浓度计算的误差。

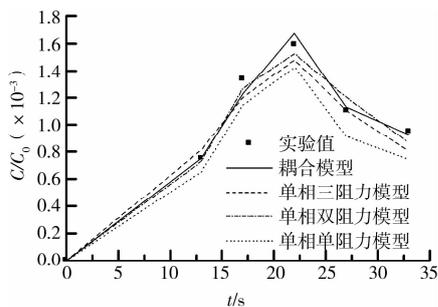


图 4 水体中三氯乙烯浓度比较

3.2.3 挥发性污染物浓度场分析 图 5 是 5 个取样断面上 $y=0.16\text{ m}$, $z=0.07\text{ m}$ 点水中三氯乙烯浓度与投放浓度 C_0 之比随时间变化关系曲线。图

中可见: 耦合模型模拟值和实验值较吻合, 离泄漏点越远的截面, 达到峰值浓度的时间越长, 且峰值浓度越低。各截面的浓度曲线在时间上不对称, 浓度衰减的速率小于其上升的速率。离泄漏点越远的截面, 浓度曲线在时间上不对称性越明显。

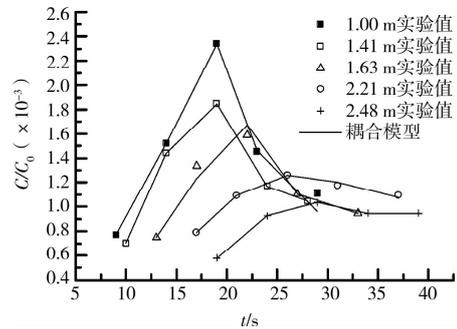


图 5 三氯乙烯浓度变化 ($y=0.16\text{ m}$)

图 6 是 5 个取样断面上 $y=0.24\text{ m}$, $z=0.07\text{ m}$ 点水中三氯乙烯浓度与投放浓度 C_0 之比随时间变化关系曲线。此图上的曲线变化规律与图 5 一致。较 $y=0.16\text{ m}$, $y=0.24\text{ m}$ 点在横向上距泄漏点远些, 故图 6 五个截面上 $y=0.24\text{ m}$ 点三氯乙烯峰值浓度比图 5 中相应的浓度低些。

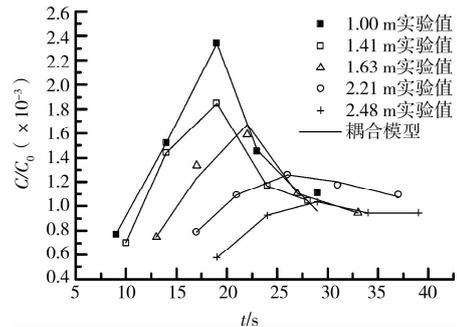


图 6 三氯乙烯浓度变化 ($y=0.24\text{ m}$)

耦合模型模拟所得 $y=0.16\text{ m}$ 纵截面上三氯乙烯各时刻浓度见图 7, 图中显示: 随流动时间延长, 污染团中心浓度下降, 同时污染团长度不断增大, 说明污染团随着水流进行有限的纵向延伸。就某固定位置而言, 浓度中心经过前的污染团长度要小于浓度中心离开后的污染团长度, 所以三氯乙烯峰值浓度后的下降速率随时间延长而变小, 也就是浓度随时间变化曲线在时间上呈现不对称特性的原因。

3.3 挥发性污染物水气耦合扩散影响因素分析

3.3.1 环境温度及挥发性污染物种类的影响 环境温度对污染物挥发作用的影响是通过无量纲亨利常数体现的。不同挥发性污染物的无量纲亨利常数受环境温度影响不同, 因此, 其水体泄漏后浓度变化也就不同。论文比较了三氯乙烯和三溴乙烷(CHBr_3)

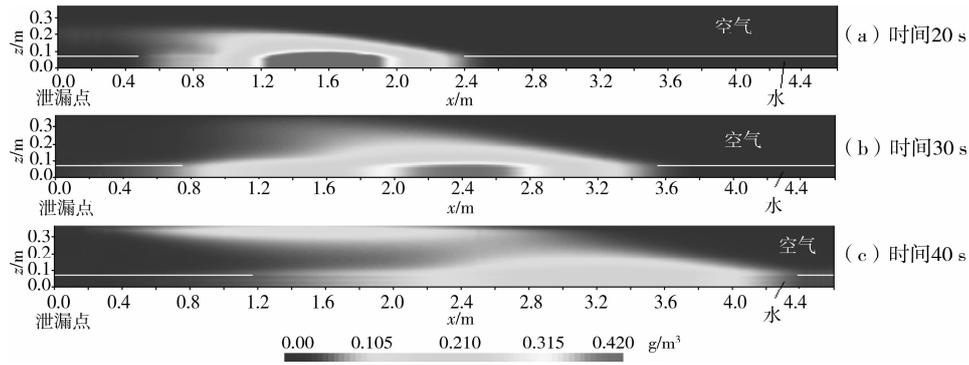


图 7 三氯乙烯泄漏各时刻浓度图

在不同环境温度下泄漏后水气耦合扩散过程。图 8 显示三氯乙烯和三溴乙烷无量纲亨利常数与环境温度的关系^[7]。随着环境温度的升高,三氯乙烯的无量纲亨利常数迅速增加,而三溴乙烷的无量纲亨利常数上升极其缓慢。

50 mL 浓度为 2 g/L 的三氯乙烯和三溴乙烷溶液泄漏后,在各环境温度下水中的峰值浓度与 0℃ 时水中的峰值浓度之比显示于图 9,忽略风速, C_{0C} 表示 0℃ 时水中三氯乙烯和三溴乙烷的峰值浓度。

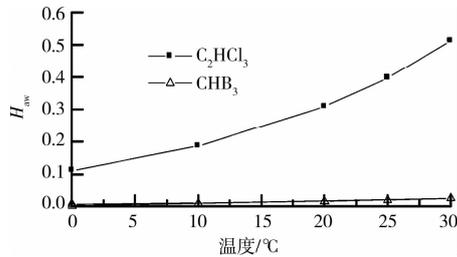


图 8 无量纲亨利常数与环境温度的关系

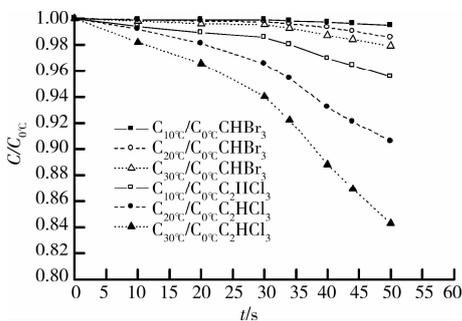


图 9 不同环境温度下水中污染物峰值浓度衰减

图 9 显示:随挥发时间的增长,环境温度为 10℃、20℃ 和 30℃ 时三溴乙烷水中的峰值浓度与其 0℃ 时水中的峰值浓度之比缓慢下降,平均每秒下降分别为 0.021%、0.060% 和 0.081%。环境温度越高,水中三溴乙烷的峰值浓度下降得越快,说明挥发作用随环境温度升高而增强。与三溴乙烷相比,随挥发时间的增长,环境温度为 10℃、20℃ 和 30℃ 时水中三氯乙烯的峰值浓度与其 0℃ 时水中的峰值浓度之比下降明显加快,平均每秒下降分别为

0.154%、0.310% 和 0.518%。这说明无量纲亨利常数随环境温度变化大的污染物的挥发作用受环境温度的影响也大。

3.3.2 风速的影响 挥发性污染物在水体和空气中的浓度相互耦合,所以水面上空气流速必然作用于气液交界面的挥发传质过程,也就影响水中污染物浓度。图 10 是环境温度 25℃ 时,不同风速下污染物泄漏 20 s 后,水中三氯乙烯和三溴乙烷峰值浓度 C 与无风时水中峰值浓度 C_{nowind} 的比较。

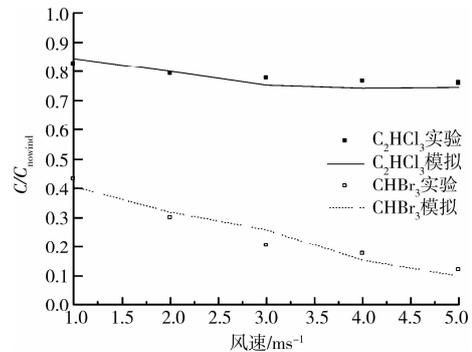


图 10 不同风速下污染物浓度比较

模拟与实验均反映了由于风速的存在,污染物挥发加速,水中污染物浓度减少,使得图 10 中 C 与 C_{nowind} 之比小于 1,且风速越大,比值越小。三溴乙烷的 C 与 C_{nowind} 之比随风速的增大下降的程度大于三氯乙烯。由双膜理论知:污染物从液相挥发到气相属相际传质过程,此传质过程中主要受到液相和气相两个方面的阻力,由于液相污染物分子间吸引力远大于其气相分子间吸引力,故液相阻力大于气相阻力,可见气液相阻力属过程量。而无量纲亨利常数是污染物气相浓度与液相浓度之比,属状态量。无量纲亨利常数越高,说明污染物气液动态平衡时气相浓度越高,污染物越易挥发,也说明挥发传质过程中气相阻力越小。因此无量纲亨利常数越高,液相阻力与气相阻力差别越大。加大风速,减小气相阻力,使得气液交界面的挥发传质总阻力降低,从而增加挥发量,这对低无量纲亨利常数的污染物起的

作用大。对于高无量纲亨利常数的污染物,液相阻力远大于气相阻力,也就是说液相阻力成为其挥发传质主要影响因素,而气相阻力的作用小,可见通过加大风速减小气相阻力并不能显著提高挥发量。因此随无量纲亨利常数的增加,污染物在水中的浓度受风速影响是减弱的。

4 结论

1) 该文构造出压缩型 VOF 算法,基于该算法,根据挥发作用中的双膜理论,利用无量纲亨利常数,建立了挥发性污染物水气耦合扩散模型,污染物在水体、空气及气液交界面的迁移过程可用该模型统一描述。压缩型 VOF 算法结合 Gamma 有界离散格式,可以自动处理界面的拓扑演化,无须进行界面重构,提高计算效率。

2) 应用挥发性污染物水气迁移耦合扩散模型,对三氯乙烯和三溴乙烯点源泄漏造成的水、空气污染实现同时、耦合模拟,模拟结果比单相模型计算的结果更接近实验值,可见挥发性污染物水气迁移耦合扩散模型较准确反映了污染物在水气交界面的传质过程。

3) 无量纲亨利常数是影响污染物耦合扩散的一重要因素。无量纲亨利常数随环境温度变化大的污染物的挥发作用受环境温度的影响也大。随无量纲亨利常数的增加,污染物在水中的浓度受风速影响是减弱的。

参考文献:

- [1] WESELY M L. Parameterization of surface resistances to gaseous dry deposition in regional-scale numerical models [J]. *Atmospheric Environment*, 1989, 23: 1293-1304.
- [2] MOOG D B, JIRKA G H. Air-water gas transfer in uniform channel flow [J]. *Journal of Hydraulic Engineering*, 1999, 125: 3-10.
- [3] BADE D L. Gas exchange at the air-water interface[J]. *Encyclopedia of Inland Waters*, 2009, 26: 70-78.
- [4] HARDT S, WONDRA F. Evaporation model for interfacial flows based on a continuum-field representation of the source terms [J]. *Journal of Computational Physics*, 2008, 227(11): 5871-5895.
- [5] MENG FAN, WEN DE-YONG, JAMES SLOAN. Modelling of air-water exchange of PCBs in the Great Lakes [J]. *Atmospheric Environment*, 2008, 42(20): 4822-4835.
- [6] MENG FAN, ZHANG BAO-NING, PHILIP GBOR, et al. Models for gas/particle partitioning, transformation and air/water surface exchange of PCBs and PCDD/Fs in CMAQ [J]. *Atmospheric Environment*, 2007, 41(39): 9111-9127.
- [7] 瑞恩 P, 施瓦茨巴赫, 菲利普 M, 等. 环境有机化学 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2004: 563-566, 598-602.
- [8] STEEMAN H J, TJOEN C, BELLEGHEM M VAN, et al. Evaluation of the different definitions of the convective mass transfer coefficient for water evaporation into air [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2009, 52: 3757-3766.
- [9] 尤学一, 刘伟. 两相流界面迁移得数值模拟 [J]. *水动力学研究与进展*, 2006, 21(6): 724-729.
- YOU XUE-YI, LIU WEI. Numerical simulation of interfacial flows [J]. *Journal of Hydrodynamics*, 2006, 21(6): 724-729.
- [10] AFKHAMI S, ZALESKI S, BUSSMANN M. A mesh-dependent model for applying dynamic contact angles to VOF simulations [J]. *Journal of Computational Physics*, 2009, 228(15): 5370-5389.
- [11] CABOUSSAT A, FRANCOIS M M, GLOWINSKI R, et al. A numerical method for interface reconstruction of triple points within a volume tracking algorithm [J]. *Mathematical and Computer Modelling*, 2008, 48: 1957-1971.
- [12] JOHN DOLBOW, STEWART MOSSO, JOSHUA ROBBINS, et al. Coupling volume-of-fluid based interface reconstructions with the extended finite element method [J]. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 2008, 197: 439-447.
- [13] LEONARD B P. Simple high-accuracy resolution program for convective modeling of discontinuities [J]. *Int J Numer Meth Fluids*, 1988, 8: 1291-1318.
- [14] DARWISH M S. A new high-resolution scheme based on the normalize variable formulation [J]. *Numer Heat Transfer, Part B* 1993, 24: 353-371.
- [15] DJAVARESHKIAN M H, REZA-ZADEH S. Application of normalized flux in pressure-based algorithm [J]. *Computers & Fluids*, 2007, 36: 1224-1234.
- [16] JASAK H, WELLER H G. High resolution NVD differencing scheme for arbitrarily unstructured meshes [J]. *J Numer Methods Fluids*. 1999, 31: 431-449.
- [17] 邹建锋, 郑耀. 有界压缩 VOF 算法在界面流问题中的应用 [J]. *浙江大学学报: 工学版*, 2008, 42(2): 253-258.
- ZOU JIAN-FENG, ZHENG YAO. Application of bounded and compressed VOF method to interfacial flow [J]. *Journal of Zhejiang University: Engineering Science*, 2008, 42(2): 253-258.
- [18] 赵宗升. 环境流体力学 [M]. 北京: 北京大学出版社, 2009.

(编辑 王秀玲)