

计算流体力学在水处理反应器优化设计运行中的应用

冯 骞¹, 薛朝霞¹, 汪 翊¹

(河海大学环境科学与工程学院, 江苏 南京 210098)

摘要 计算流体力学主要通过计算机模拟获得流体在特定条件下的有关信息, 这一技术的出现和发展, 使得利用数学模型精确模拟水处理反应器设计条件下的处理过程成为可能。综述了应用计算流体力学优化水处理反应器设计和运行的国内外研究, 指出了研究中存在的问题: ①未从生化反应的基本原理出发建立基于流动、环境因子浓度分布和生化反应的数值模型, 优化反应器的设计和运行; ②缺乏足够的实验数据验证数值模拟结果。在此基础上提出了今后的研究重点。

关键词 计算流体力学; 水处理反应器; 数值模拟; 优化设计

中图分类号 :O35 ,X505 **文献标识码** :A **文章编号** :1004-693X(2006)02-0011-05

Application of CFD theory in optimal design and operation of water treatment reactor

FENG Qian , XUE Zhao-xia , WANG Hui

(College of Environmental Science and Engineering , Hohai University , Nanjing 210098 , China)

Abstract :The presence and development of computational fluid dynamics(CFD) , with which the information about the fluid under special conditions is available by computer simulation , make the accurate simulation in water treatment reactor possible . This paper summarizes the usage of CFD in optimal design and operation of water treatment reactor . Problems in the research are pointed out , including without establishment of biochemical reaction model based on flow and concentration distribution of environmental parameters from the basic principle of biochemical reaction and lack of sufficient field data to validate the numerical model . The important research issues of further study are also pointed out .

Key words :computational fluid Dynamics ; water treatment reactor ; numerical simulation ; optimal design

在水处理工程中,能进行水处理效应的单元构筑物、设备和容器都可以称为反应器^[1]。目前水处理反应器的设计多依据给水排水设计手册和相关规范中确定的经验参数和公式进行,这些经验参数和公式是根据大量工程实践总结得出的,使用简捷方便,应用多年来取得了一定的效果,为水处理工程的设计和运行提供了有力的支持。但在设计过程中,也存在设计参数范围较宽、参数选择经验性较强的问题,一旦参数略有差异,可能对水处理反应器的水力混合过程和处理效果造成较大的影响。大量研究表明,仅依据经验公式设计的水处理反应器不能保

证水力混合状态良好,也无法对其运行效果进行较为精确的预测,更无法实现水处理反应器的优化设计和运行。

流体是水处理反应器中物质和能量传递的主要载体,反应器的水力特性直接影响反应器的混合过程,制约着反应器的处理效果。因此,利用流体力学的方法研究反应器的水力特性,结合反应器基本原理建立反应器模拟和分析的数学模型,对反应器的设计和运行状况进行分析,将为水处理反应器的优化设计和运行开辟一条新的思路和方法。

1 概述

计算流体力学(Computational Fluid Dynamics, 缩写为 CFD)是流体力学理论研究的一个分支,它主要通过有限差分、有限单元或有限体积等方法将控制方程离散后,利用计算机进行数值求解,最终通过数值模拟获得流体在特定条件下的有关信息。这一技术的出现和发展,改变了目前采用脉冲示踪法或阶跃示踪法^[2-5]通过测定反应器停留时间的分布来分析反应器水力特性的现状,解决了流体参量在反应器(池)中均化分布的缺陷,也使利用数学模型精确模拟水处理单元在设计条件下的流动特性和行为成为可能,为反应器模拟和分析数学模型的建立提供了一种有效手段。同时,利用 CFD 技术有利于减少反应器分析中物理模型研究的必要性,降低研究成本,实现反应器的优化设计和运行。美国有报道表明,在污水处理厂处理单元构筑物的设计和运行中使用 CFD 技术后,优化了反应器的设计,解决了运行中存在的问题,反应器的处理效率也提高了 10%~35%^[6]。

1.1 应用 CFD 技术优化水处理反应器设计和运行的国外研究

CFD 技术在国外起步早,发展也较快,在各类水处理反应器的设计和运行中也有不少应用报道。

1.1.1 在沉淀池及其他固液分离反应器(池)中的应用

这类固液分离反应器主要包括沉淀池、沉砂池和格栅等,在其中进行的处理属于物理过程。水中的悬浮杂质在水流和重力的共同作用下,通过自然沉淀、筛滤和截留等方式在反应器中被截留,实现不同粒径的固体杂质与水体的分离。由于此类反应器处理过程不涉及化学和生物反应,处理机理相对简单,利用 CFD 技术建立的数学模型也相对简单。

1977 年, Larsen 首先将混合长理论用于平流式沉淀池水流紊动黏性系数的计算中^①,并在此基础上提出了一个相对完整的沉淀池计算数学模型,用于沉淀池运行过程的分析,这也是 CFD 技术应用水处理领域最早的报道之一。但这一模型只求解了一维条件下的流动方程,对流场特性的分析不够全面,对处理效果的研究也仅停留在流场分析的基础上,未能利用流场分析结果进一步求解悬浮物浓度场,考察沉淀池出口处悬浮物浓度分布,研究沉淀池运行效果。20 世纪 80 年代,随着 CFD 技术的发展,应用二维 $k-\epsilon$ 紊流模型分析沉淀池水流状况,并与悬

浮物输移模型结合组成沉淀池模拟的数值模型,也在沉淀池的优化设计和运行中得到了一定的应用。数值模型中采用的离散方法涵盖了有限差分法、有限单元法和有限体积法,涉及的沉淀池型式包括矩形平流式沉淀池(rectangular tank)、圆形辐流式沉淀池(circular tank)、平底澄清池(flat bottom clarifier)、薄片分离器(lamella/plate separator)、絮凝沉淀池等^[7-14]。此外, Weiss 等和 Spence 也分别利用 CFD 技术,在格栅和旋流式沉砂池中建立了相应型式反应器中的数值分析模型,并预测了固液分离的效率^[15,16]。

在这部分研究中,多采用 CFD 技术模拟二维流场,在流场分析的基础上,通过对设计工况下反应器出口悬浮物浓度的预测,分析反应器设计和运行状况,提出相应优化方案。与建立在反应器理论上的传统模型相比,利用 CFD 技术建立的数值模型能更准确地分析反应器中的流场和悬浮物浓度场分布,实现反应器的优化设计和运行。但在实际过程中也发现,反应器型式、沉降的边壁条件和悬浮物浓度的不同会形成不同类型的沉降过程,造成悬浮物沉降规律的差别。如沉砂池中悬浮物多以拥挤沉降规律为主,絮凝沉淀池中则表现出颗粒在沉降过程中不断增大的沉降规律。对不同类型的沉降规律研究的不足,也会制约悬浮物输移模型模拟的准确度,影响反应器设计和运行优化的可靠性。

1.1.2 在化学处理反应器(池)中的应用

这类反应器主要有混凝反应池、消毒池、超临界氧化池等。在化学处理反应器中,往往需要通过某些特定的化学反应产生具有一定化学处理能力的化学物质,并随水流扩散到反应器中,才能实现杂质的去除,保障处理的效果。例如混凝剂在混合单元中,往往需要通过水解反应,形成具有混凝效果的水合离子,并迅速分散到原水中,才能保证混凝的效果;液氯或臭氧消毒反应器中,也需要通过相应的化学反应,产生具有强氧化能力的次氯酸或原子氧,并通过水流运动扩散到反应器后才能发挥良好的消毒作用。考虑到反应器中发挥处理效果的化学物质浓度分布会直接影响反应器的处理效果,对此类反应器设计和运行状况的分析,除了需要利用 CFD 技术对反应器中水流特性分析外,还必须结合工程的实际情况,确定化学反应产生的这些化学物质的发生量,在流场分析的基础上预测它们的浓度扩散和分布规律,进而判断反应器的设计及运行效果。

美国亚利桑那州 66% 的污水处理厂在消毒工

① LARSEN P. On the hydraulics of rectangular setting basins-experimental and theoretical studies report No. 1001, Lund Institute of Technology, Lund, Sweden, 1977.

艺中使用 CFD 技术优化消毒池的设计和运行过程,结果表明,通过合理调整接触池的工艺尺寸可以改善反应器的水力特性,减少池中短流发生的可能性,实际降低氯耗 20% ~ 70%^[17]。Do-Quang 等、Evans 等、Murrer 等^[18-20]在臭氧接触消毒池的设计中也分别进行过类似的尝试,并在实际工作中得到了验证。在紫外线消毒反应器中,Janex 等和 Blatchley 等也利用 CFD 技术和 LS(Linear Source Integration Model)源强发生模式组合成的综合软件系统,模拟了设计和运行参数对反应器运行的影响,提出了优化反应器的设计方案,并在实验室条件下得到了验证^[21-23]。此外,在混凝反应器、超临界水氧化反应器等化学处理反应器的优化设计和运行中应用 CFD 技术,也有一些相关报道。

与前一类反应器相比,影响处理效果的化学物质在化学处理反应器中的分布成为考察反应器设计和运行效果的关键。相关研究中采用了 CFD 技术分析反应器中的流场和化学物质浓度场,并以此为基准对反应器设计和运行的效果进行分析,但这种分析方法并未能真正建立基于反应处理效果指标分析的反应器数值模拟模型,应用中也存在着处理效果的化学物质浓度与水质指标的关系复杂,最优化学物质浓度不易取得的弊病,影响反应器的优化设计和运行。

1.1.3 在生物处理反应器中的应用

生物反应器利用自凝聚形成的活性污泥或黏附在载体上形成的生物膜这两种微生物聚集体,在水流对物质和能量的传递作用下,从水中吸附溶解性的多种污染物,合成微生物细胞,自身增殖的同时降解水中的污染物质。CFD 技术应用于生物处理反应器中,主要通过分析反应器中的流场和影响微生物生长的环境因素变化,优化反应器的设计和运行。

塘系统是最接近自然降解状态的生物处理反应器。Wood 等^[24]利用技术,采用 FIDAP 有限元软件建立了四塘串联系统稳态条件下的二维流动模型,并用于废水稳定塘的运行效果分析和优化设计中。Vega 等^[25]利用 MIKE 21 软件分析了哥伦比亚西南部的一个厌氧塘的运行过程,通过模拟不同污泥量、不同进出口位置、不同隔板位置和不同几何尺寸的氧化塘中的流场,提出了氧化塘的优化设计方案:十字交叉(对角相对)的进出口分布、2:1 的长宽比、在 1/3 长和 2/3 长的位置放置两个隔板。Salter 等^[26]则利用 CFD 技术模拟了泰国一个低 BOD 去除率的氧化塘的运行过程,发现了其中的短流现象,并比较了恒定流条件下有挡板和无挡板时氧化塘的流速和停留时间分布。近年来利用 Phoenics、Fluent 等其他

CFD 通用软件,进行塘系统设计和运行优化的研究也有一些报道^[27-29]。活性污泥反应器(池)中,污泥、水和氧气间的多相传质过程更为复杂。Karama 等^[30]利用 PHOENICS 软件模拟了不同结构参数下活性污泥反应池的运行工况,分析了活性污泥反应器中低溶解氧区域的分布和变化,并与试验数据进行了对比,在此基础上提出了优化设计的方案。Cockx 等^[31]则用 ASTRID 软件,对两相流生化反应器的设计和运行进行了模拟优化,并在给定初始界面质量传递条件下,精确地预测了气提循环式反应器和活性污泥反应器中溶解氧浓度。

与物理处理和化学处理反应器相比,生物处理反应器由于涉及生化反应、多相流动以及气固液间的物质、能量传递等多领域的问题,模拟分析最为复杂。鉴于反应器中流动本身的复杂性,多数研究者在利用 CFD 进行流场分析时仍以单相流动为主,仅有少数研究者考虑了反应器中生物絮体的影响,采用了两相流理论进行分析。这种流动的单相假设尽管简化了数值模拟的过程,但却造成了研究中模拟过程的偏差。对流动状况的分析缺乏足够有效的实测数据进行验证,也制约了 CFD 应用的深入。此外,在模拟生物反应器设计和运行状况时,研究也多基于流动状态分析和溶解氧分布模拟,从反应器中是否发生短流或溶解氧是否会成为受限因子来考察反应器的处理效果,并未能真正结合生化反应的基本原理,从微生物生长的角度建立基于流动、环境因子浓度分布和生化反应的生物反应器数值模型。

1.2 应用 CFD 技术优化水处理反应器设计和运行的国内研究

国内 CFD 技术最早应用于水处理反应器中的报道出现在 1997 年,清华大学的张庄^[32]利用 $k-\epsilon$ 紊流模型分析了中心进水的辐流式沉淀池的运行,模拟了沉淀池的流态和悬浮物的浓度分布,并比较了挡板不同位置对处理效果的影响。河海大学的蔡金傍、何国建^[33,34]也分别利用二维紊流模型,基于不同的悬浮物沉降规律,分析了实际条件下不同进口挡板高度、进口流速和长高比对平流式沉淀池流态和悬浮物去除效果的影响。在化学和生物处理反应器中,詹咏^[35]利用平面二维 N-S 方程分析了絮凝池中不同边壁条件下的流场,结合模型试验研究了边壁条件对絮凝效果的影响,季民等^[36]则对移动床生物膜反应器(MBBR)中的流场进行了二维数值模拟,并在实验室条件下得到了实测数据的验证;庞虹等^[37]利用 Phoenics 软件模拟了海水淡化装置中闪发腔内的流场,分析了绕流板的设置对反应器内流体湍流度的影响,并提出了改变闪发腔内流动情况

来提高效率的方法,毛劲乔³⁸基于垂向二维流动建立了推流式曝气池气液两相流的数学模型,模拟了曝气池中的流场和 DO 浓度分布,提出了改变进水口位置、调整进水口与池底角度、调整长宽比等曝气池优化设计的建议;张小可等³⁹也利用 Fluent 提供的两相流模型,进行了海水脱硫曝气池流场和 DO 浓度场的二维模拟,得到了曝气池设计的相关参数。

从国内研究的现状来看,我国在应用 CFD 技术优化水处理反应器的设计和运行方面仍处于起步阶段,与国外相比差距较大,主要表现在:①利用 CFD 技术优化反应器设计和运行的研究以流场分析为主,多从反应器结构、运行条件的改变对水力特性影响的角度提出优化设计和运行的措施;②数值模拟结果缺乏模型试验或实测数据验证。

2 结 论

计算流体力学(CFD)技术包含了数学、计算机科学、工程学和物理学等多种学科,这些学科的知识综合起来,提供了建立水处理反应器流动模型的方式和方法。这一技术应用于水处理反应器的设计和运行中,不仅丰富了水处理工程领域研究的手段,而且能够利用数值模拟的方法,分析反应器的运行状况,对于减少物理模拟必要性,节约研究资金和时间,都有着重要的价值,同时还有助于解决某些由于实验技术手段限制,难以进行测试的问题。

综合前述分析,今后的研究应当从以下几个方面着手:

a. 深入研究不同类型反应器中发生的物理、化学和生物过程,建立这些处理过程规律的数学模式,结合 CFD 技术对反应器中流场和物料混合状态的分析,建立不同类型处理过程模拟的反应器数值模型,促进反应器的优化设计和运行。

水处理反应器中应用 CFD 技术优化反应器的设计和运行时,往往需要模拟多种尺度的物理现象,这些物理、化学和生物处理过程分析的准确性,直接影响反应器的优化设计和运行。此外,建立处理过程中物料浓度与处理效果之间的数值模型,也有助于反应器的运行效果的考核,提高反应器优化设计的可靠性。

b. 使用和开发新型流动测试技术,为 CFD 技术在水处理反应器优化设计和运行中的应用提供试验数据的支持。

应用 CFD 技术模拟分析反应器的工作状况,优化反应器的设计和运行的另一个主要难点,在于数值模拟预测出反应器内的流场和物料分布缺乏有效的检测手段和足够的实验数据来验证、校核计算结

果。因此使用和开发新型流动测试技术,如 PIV (Particle Imaging Velocimetry) LDV (Laser Doppler Velocimetry) 等,来验证校核数值模拟的结果,也将极大地促进 CFD 技术在水处理反应器中的应用。

c. 分析流场特性与物料特性之间的互动影响关系,根据反应器发生反应的物料不同形态,采用单相或多相流动模式,模拟反应器的运行,提高 CFD 技术模拟流场和物料浓度分布的准确性。

通常情况下对反应器的模拟多建立在单相流理论的基础上,它认为流场特性影响物料迁移和输送,而物料的特性并不影响流场的特性。但在某些生物处理反应器中,生物絮体的存在和曝气的应用使得流动成为固相、液相、气相均有物质和能量交换的多相流动,从而影响流场特性的分析结果。因此,分析流场特性与生物絮体特性之间的互动影响关系,在生物反应器中研究基于多相流理论的 CFD 技术,模拟反应器的运行,对于提高反应器模拟的精度,保障优化设计措施的可靠性都有重要的意义。

通过对上述各方面的研究,可以真正实现 CFD 技术在水处理领域的有效应用,精确模拟水处理过程,为优化水处理反应器的设计和运行,强化水处理反应器的处理效果提供有利的支持。

参考文献:

- [1] 许保玖. 水质科学与工程理论丛书——给水处理理论 [M]. 北京: 中国建筑工业出版社, 2000.
- [2] NEWELL B. Characterizing bioreactor mixing with residence time distribution (RTD) tests [J]. Water Sci Technol, 1998, 37 (12): 43-47.
- [3] 戚以政. 生化反应动力学与反应器 [M]. 北京: 化学工业出版社, 1996.
- [4] 卡尔许格尔. 生物反应工程 [M]. 王建华译. 成都: 成都科技大学出版社, 1995.
- [5] 陈常贵, 柴诚敬, 姚玉英. 化工原理 [M]. 天津: 天津大学出版社, 2004.
- [6] NISIPEANU, EUGEN, HARWOOD, et al. CFD analysis streamlines equipment design [J]. Water and Wastewater Inter, 2002, 17(1): 29-30.
- [7] QUEINNEC I, DOCHAIN O. Modelling and simulation of the steady-state of secondary settlers in wastewater treatment plants [J]. Water Sci Technol, 2001, 43(7): 39-46.
- [8] ABDEL-GAWSAD S M, MCCORQUODALE J A. Numerical simulation of rectangular settling tanks [J]. Jour of IAHR, 1985, 23(2): 85-100.
- [9] IMAM E, MCCORQUODALE J A, BOWTRA J K. Numerical modeling of sedimentation tanks [J]. ASCE Jour of Hydraulic Eng, 1983, 113(1): 80-94.
- [10] ZHOU S, MCCORQUODALE J A. Modeling of rectangular settling tanks [J]. ASCE Jour of Hydraulic Eng, 1992, 118

(10):1391-1405.

- [11] DeVANTIER B A ,LAROCC B E. Modeling Sediment-induced density currents in sedimentation basin[J]. ASCE Jour of Hydraulic Eng ,1987 ,113(1) :80-94.
- [12] BRETSCHER U ,KREBS P ,HAGER W H. Improvement of flow in final settling tanks[J]. ASCE Jour of Enviromental Eng ,1992 ,118(3) :307-321.
- [13] TA T C. Current role of CFD in the design of clarifiers used in water and waste water industries[J]. ASME ,Pressure Vessels and Piping Division 2001 431 :11-15.
- [14] LAINE S ,PHAN L ,PELLARIN P ,et al. Operating diagnostics on a flocculator-settling tank using fluent CFD software[J]. Water Sci Technol ,1999 39(4) :155-162.
- [15] WEISS G J ,GEBHARD J ,MICHELBAACH S. Vortex separator : dimensionless properties and calculation of annual separation efficiencies[J]. Water Sci Technol ,1996 33(9) : 277-284.
- [16] SPENCE S. Performance prediction of screens through flow modeling[J]. Water Services 2001 104(2) :14-15.
- [17] REDDY ,SANJAY. Computer simulation : Reducing cost of chlorine in wastewater plant[J]. Chem Eng World ,2003 38(4) :66-67.
- [18] DO-QUANG Z ,COCKX A ,LAINE J M ,et al. Applying CFD modelling in order to enhance water treatment reactors efficiency : Example of the ozonation process[J]. Water Sci Technol : Water Supply 2001 4(4) :125-130.
- [19] EVANS H ,BAUER M ,GOODMAN N ,et al. The role of ozone in improving drinking water quality in London and Oxford[J]. Ozone : Science and Engineering ,2003 25(5) : 409-416.
- [20] MURRER E ,JOHN G ,GUNSTEAD S ,et al. Development of an ozone contact tank simulation model[J]. Ozone : Science and Engineering ,1995 17(6) : 607-617.
- [21] JANEX M L ,SAVOYE P ,DO-QUANG Z ,et al. Impact of water quality and reactor hydrodynamics on wastewater disinfection by UV ,use of CFD modeling for performance optimization[J]. Water Sci Technol ,1998 38(6) : 71-78.
- [22] BLATCHLEY ,ERNEST R III ,Do - Quang ,et al. Process modeling of ultraviolet disinfection[J]. Water Sci Technol , 1998 38(6) : 63-69.
- [23] JANEX M L ,NACE A ,DO-QUANG ,et al. UV fluence rate evaluation in a UV system : Simulating the impact of operating and design parameters[J]. Inter Water and Irrigation ,2003 , 23(2) :17-20.
- [24] WOOD M G ,GREENFIELD P F ,HOWES T ,et al. Computational fluid dynamic modelling of wastewater ponds to improve design[J]. Water Sci Technol ,1995 31(12) :111- 118.
- [25] VEGA G P ,PENA M R ,RAMIREZ C ,et al. Application of CFD modelling to study the hydrodynamics of various anaerobic pond configurations[J]. Wat Sci Technol 2003 48

(2) :163-171.

- [26] SALTER H E ,TA C T ,OUKI S K ,et al. Three-dimensional computational fluid dynamic modelling of a facultative lagoon [J]. Wat Sci Technol 2000 42(10-11) :335-342.
- [27] PENA M R ,MARA D D ,SANCHEZ A. Dispersion studies in anaerobic ponds : Implications for design and operation[J]. Water Sci Technol 2000 42(10-11) : 273-282.
- [28] KRETSEER D ,MATTHEWS B ,WILLIAMS M ,et al. Use of computational fluid dynamics to investigate natural and mechanically induced flows in an aerated lagoon[J]. Tappi Journal 2003 4(4) :12-14.
- [29] SHILTON A. Potential application of computational fluid dynamics to pond design[J]. Water Sci Technol 2000 42(10 -11) : 327-334.
- [30] KARAMA A B ,ONYEJEKWE O O ,BROUCKAERT C J ,et al. Use of computational fluid dynamics (CFD). Technique for evaluating the efficiency of an activated sludge reactor [J]. Water Sci Technol ,1999 39(10-11) : 329-332.
- [31] COCKX A ,DO-QUANG Z ,AUDIC J M ,et al. Global and local mass transfer coefficients in waste water treatment process by computational fluid dynamics[J]. Chem Eng and Pro 2001 40(2) :187-194.
- [32] 张庄. 沉沙池水力特性与悬浮物去除率[J]. 水动力学研究与进展 :A 辑 ,1997 ,12(2) :217-225.
- [33] 蔡金榜. 沉淀池水流流态的数值模拟及结构优化研究 [D]. 南京 :河海大学 2002.
- [34] 何国建. 沉淀池重要结构参数研究 [D]. 南京 :河海大学 2004.
- [35] 詹咏. 水流对混凝沉淀的影响 [D]. 南京 :河海大学 , 2002.
- [36] 季民 ,董广瑞. 移动床生物膜反应器水力特性的数值模拟 [J]. 中国给水排水 2002 18(5) :14-17.
- [37] 庞虹 ,姚征. 大型海水淡化装置流场数值模拟及其优化 [J]. 地质灾害与环境保护 2004 15(1) :37-41.
- [38] 毛劲乔. 曝气池气液两相数学模型的建立与应用 [D]. 南京 :河海大学 2002.
- [39] 张小可 ,姚彤. 海水脱硫曝气池流场的 CFD 分析 [J]. 动力工程 2004 24(2) :276-279.

(收稿日期 2004-09-16 编辑 高渭文)

(上接第 10 页)

- [5] 张强 ,鞠笑生 ,李淑华. 三种干旱指标的比较和新指标的确定 [J]. 气象科技 ,1998(2) :48-52.
- [6] 耿玉琴. 太湖流域降雨时空分布规律分析 [J]. 海河水利 2003(3) :33-35.
- [7] 周文智. 中国水旱灾害 [M]. 北京 :中国水利水电出版社 ,1997 311-312.
- [8] 黄道友 ,彭廷柏 ,王克林. 应用 Z 指数方法判断南方季节性干旱的结果分析 [J]. 中国农业气象 2003 24(4) :12- 15.

(收稿日期 2005-09-15 编辑 高渭文)