

DOI: 10.13671/j.hjkxxb.2015.0099

张良俊, 胡伟莲, 陈纪忠. 2015. 内循环厌氧反应器流动模型及反应过程模拟[J]. 环境科学学报, 35(12): 3789-3796

Zhang L Q, Hu W L, Chen J Z. 2015. The study of flow model and reaction process simulation of inner circulation anaerobic reactor[J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 35(12): 3789-3796

内循环厌氧反应器流动模型及反应过程模拟

张良俊^{1,*}, 胡伟莲¹, 陈纪忠²

1. 浙江科技学院生物与化学工程学院, 杭州 310023

2. 浙江大学化学工程和生物工程学系, 杭州 310007

收稿日期: 2015-01-18

修回日期: 2015-02-11

录用日期: 2015-02-27

摘要:为揭示内循环厌氧反应器放大过程中所出现的规律, 本文对反应器中流动模型和反应过程进行了模拟研究, 通过对主反应区的停留时间分布的实验研究, 确定了主反应区流型可用一平推流与两个并联的全混流进行串联的三参数组合模型进行模拟. 在实验范围内, 平推流区所占的体积分数约为 36%, 两个全混流区所占的体积分数分别为 53% 和 11%. 结合厌氧反应动力学方程, 应用组合模型模拟了实际反应器的状态, 并和实验值进行了对比, 发现反应器出口处 CH₄ 体积流量最大误差为 9.67%, 在可允许的范围内. 同时, 模拟了基质初始 COD 和温度变化对反应器出口状态的影响. 研究表明, 与其它模型相比, 组合模型计算简洁, 同时又有较好的精度, 能够满足反应器的设计需要.

关键词:厌氧反应器; 流动模型; 反应过程模拟

文章编号: 0253-2468(2015)12-3789-08

中图分类号: X703

文献标识码: A

The study of flow model and reaction process simulation of inner circulation anaerobic reactor

ZHANG Liangquan^{1,*}, HU Weilian¹, CHEN Jizhong²

1. School of Biological and Chemical Engineering, Zhejiang University of Science and Technology, Hangzhou 310023

2. Department of Chemical and Biochemical Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310007

Received 18 January 2015;

received in revised form 11 February 2015;

accepted 27 February 2015

Abstract: To reveal the mechanism in the amplification of internal circulation anaerobic reactor, research was conducted to focus on the simulation of the flow model and reaction process. Through the experiment of the residence time distribution in the main reaction zone, it can be confirmed that the flow in the main reaction zone can be simulated with a three-parameter model, which is connected with a plug flow type and a full mixed model combining with two parallel series. In the experimental range, plug flow zone occupies the volume fraction of about 36%, and two full mixed zone occupies the volume fraction rates are 53% and 11%. According to anaerobic reactor kinetics equations, application portfolio model has simulated the real state of the reactor and does comparison with the experimental values. The maximal error of CH₄ volume flow from the reactor outlet can be 9.67%, in an allowable range; At the same time it also simulates the influence of the matrix initial COD's concentration and temperature changes on the state of the reactor outlet. Compared with other models, the combined model is simple in calculations, and also has high accuracy to meet the needs of the reactor design.

Keywords: anaerobic reactor; flow model; reaction process simulation

1 引言 (Introduction)

当前, 一些学者对厌氧反应器流场和水力学性能进行了研究, 例如, 王卫京等 (2010; 2011) 应用湍流模型模拟了侧伸搅拌式厌氧反应器流场, 季军远等 (2012) 采取多釜串联及扩散模型模拟了分段组

合式厌氧反应器行为, 邹尧等 (2012) 通过测定停留时间分布研究了厌氧反应器中不同反应区的流动特征. 这些研究取得了一定成果, 但由于模型相对简单, 对于构造复杂的内循环厌氧反应器不能完全适用. 同时, 将动力学方程和流动模型结合以模拟厌氧反应器中反应过程的研究则较少有文献 (Diamantis

基金项目: 浙江省科技厅资助项目 (No. 2009C32084)

Supported by the Program of the Science Technology Department of Zhejiang Province (No. 2009C32084)

作者简介: 张良俊 (1965—), 男, 教授 (博士), E-mail: zhlq816@163.com; * 通讯作者 (责任作者)

Biography: ZHANG Liangquan (1965—), male, professor (Ph.D.), E-mail: zhlq816@163.com; * Corresponding author

et al., 2007; 张良侓等, 2011; 张倩倩等, 2013) 涉及。基于此, 本文在建立厌氧反应动力学方程后, 针对自主设计的内循环厌氧反应器采取组合模型进行模拟研究。厌氧反应过程中由于有气体生成, 气体从产生到形成气泡, 以及气泡在反应器中的向上运动必然会对整个反应器的流动型式产生重大的影响, 使得反应器的流型偏离于理想状况。为此, 本文通过测定实际反应器中流体的停留时间分布, 根据停留时间分布的特征提出流动的组合模型, 并据此研究实际的反应过程, 以期对内循环厌氧反应器的进一步工业化放大提供有益的开发思路和方法。

2 实验方法 (Methods)

接种污泥为某啤酒厂 UASB 反应器中活性污泥; 营养液参照产甲烷活性测定营养液配制方法进行配制; 牲畜废水为牲畜粪便经过淘洗、过滤去除大颗粒泥沙及部分悬浮物后所得的液体, 粪便取自某养猪场; 示踪剂为硝酸钠 (分析纯), 由杭州化学试剂有限公司提供。

主要仪器: FA1104N 型电子天平、DFG-9053A 型电热恒温鼓风干燥箱、TC-15 型恒温电热套、SC-15 型数控超级恒温槽、BT01-YZ1515 型蠕动泵、GC-1690B 型气相色谱仪

2.1 内循环厌氧反应器主反应区停留时间分布密度函数 $E(t)$ 的实验测定流程

为建立厌氧反应器的流动模型, 实验研究了反应器停留时间分布, 并考察了不同气体流量的影响, 获得了停留时间分布函数。内循环厌氧反应器由主、次两反应区组成, 由于反应主要在主反应区 4 进行, 因此, 实验主要针对反应区 4 进行停留时间分布测定。实验流程如图 1 所示。

以水为工作介质, 将水加入进水罐至一定高度, 开启蠕动泵, 保持水流量为 $15 \text{ L} \cdot \text{h}^{-1}$, 流量计安装在泵出口处; 同时开启气泵, 气泵流量由安装在泵出口处的气体流量计检测, 分别为 0 、 90 、 $180 \text{ mL} \cdot \text{h}^{-1}$ 。水从下而上流过反应器, 反应器分为上下两部分, 下部为主反应区, 内径为 110 mm , 高 550 mm , 几何体积为 5 L ; 上部为次反应区, 又分为两部分, 一是内反应区 5, 另一为环隙反应区 9, 环隙反应区几何体积 V_{R4} 为 2.44 L , 内反应区几何体积 V_{R5} 为 2.86 L 。在环隙反应区的上部安装有气体出口管, 由于测定的是主反应区停留时间分布, 故液体在主反应区上部出水口处排出, 出水口处同时安装一电导

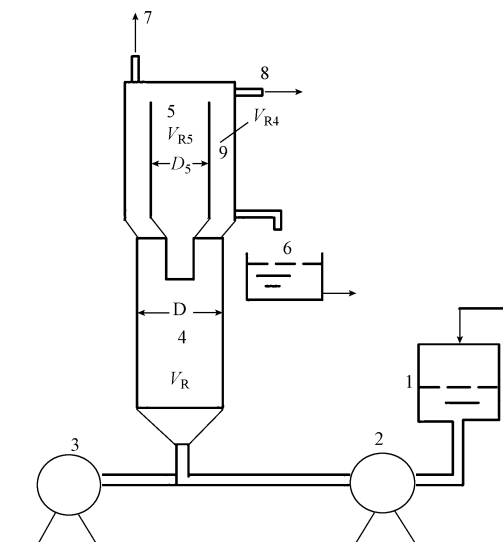


图 1 工艺流程示意图 (1. 进水罐, 2. 蠕动泵, 3. 气泵, 4. 主反应区, 5. 内反应区, 6. 出水口, 7. 气体出口, 8. 反应液出口, 9. 环隙反应区)

Fig. 1 Schematic diagram of process flow

仪, 通过检测出口液体的电导率而推算出示踪物浓度的高低。

当气液两相流动达到稳定后, 在进水罐上方快速加入一定量的示踪剂, 同时计时, 间隔一定时间, 于反应器出口处记录下水的电导率随时间的变化。

2.2 验证实验工艺流程

验证实验工艺流程示意图如图 2 所示。新鲜料液加入储槽中, 料液由蠕动泵输送, 进入换热器中, 换热器由 10 根有机玻璃管组成, 管外径为 10 mm , 长 65 mm , 料液走管程, 与循环水换热后进入反应器, 在次反应区顶部进行气液分离, 液体进入废液槽, 气体经过气体流量计后由缓冲瓶进入液封槽, 液封槽容积为 1500 mL , 最后进入皂沫流量计计量放空。

由于新鲜料液配料较为困难, 当系统稳定, 即气体流量变化不大时, 每隔 4 h 分别测量气液两相组成、流量, 一般测量 $2 \sim 3$ 次结束实验。

2.3 内循环厌氧反应器主反应区流动模型建立

对反应器主反应区流动状况作出如下假设: 示踪物 A 为瞬间脉冲进料; 反应器中气体流量恒定不变, 且均匀上升; 进料清水流量亦恒定不变。现假设厌氧反应器主反应区流动型态可由一平推流区 (PFR) 与两个并联的全混区 (CSTR) 串联组合而成, 模型示意图如图 3 所示。

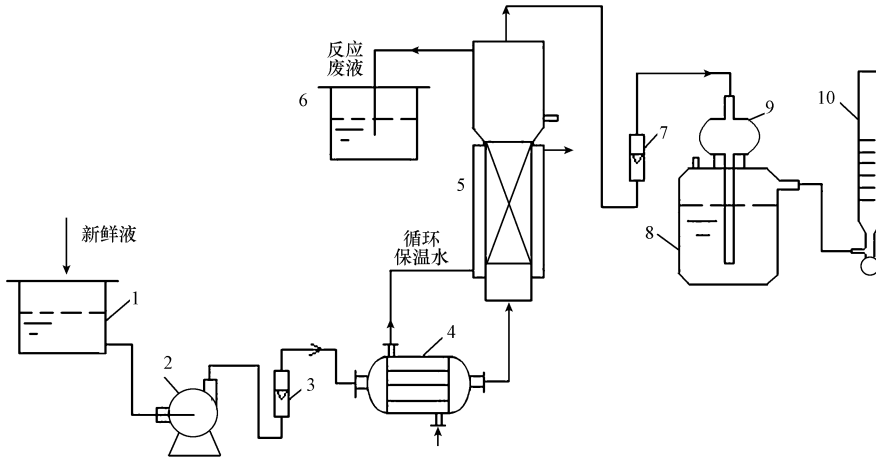


图2 验证实验工艺流程示意图(1.原料液储槽,2.蠕动泵,3.流量计,4.换热器,5.反应器,6.反应废液槽,7.气体流量计,8.液封槽,9.缓冲瓶,10.皂沫流量计)

Fig.2 Schematic diagram of technological process in confirmatory experiment

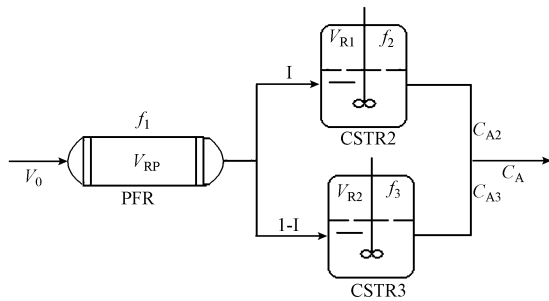


图3 反应器流动模型组合示意图

Fig.3 Schematic diagram of the reactor combination of flow model

设反应器主反应区总体积为 V_R , 等于模型中各反应区体积 V_{Ri} 之和, 设 PFR 的体积分率为 f_1 , CSTR2、CSTR3 的体积分率分别为 f_2, f_3 , 总流量为 v_0 , 流经 CSTR2 的流量分率为 I , 某时刻流出 CSTR2、CSTR3 全混区的流体中示踪剂浓度分别为 C_{A2}, C_{A3} , 混合后出口总浓度为 C_A . 当 $t = 0$ 时, 在 PFR 反应器入口处, 脉冲法加入质量为 M 的饱和示踪剂 A. 对于 PFR:

$$f_1 = 1 - f_2 - f_3 \quad (1)$$

$$V_{RP} = (1 - f_2 - f_3) V_R \quad (2)$$

$$\bar{t}_p = V_{RP}/v_0 = \frac{(1 - f_2 - f_3) V_R}{v_0} \quad (3)$$

式中, V_{RP} 为 PFR 的体积(L); \bar{t}_p 为流体在 PFR 中的平均停留时间(min).

对 CSTR2 进行物料衡算, 求取 CSTR2 出口浓度 C_{A2} : ①当 $t < \bar{t}_p$ 时, 由于示踪剂 A 仍在 PFR 中, 对 CSTR2, $C_{A2} = 0$; ②当 $t \geq \bar{t}_p$ 时, 对 CSTR2 作物料衡算, 根据输入量 = 输出量 + 累计量, 则有:

$$0 = I v_0 C_{A2} + \frac{d(f_2 V_R C_{A2})}{dt} \quad (4)$$

$$\bar{t}_2 = \frac{f_2 V_R}{I v_0} \quad (\text{CSTR2 的平均停留时间}) \quad (5)$$

$$C_{A2} = - \frac{V_R f_2 dC_{A2}}{I v_0 dt} = - \bar{t}_2 \frac{dC_{A2}}{dt} \quad (6)$$

$$t = \bar{t}_p C_{A2} = \frac{IM}{f_2 V_{R2}} = \frac{C_0}{t_2} \quad (7)$$

$$C_0 = \frac{M}{v_0} \quad (8)$$

$$\text{求解该方程, 得: } C_{A2} = \frac{C_0}{\bar{t}_2} e^{-(t - \bar{t}_p) / \bar{t}_2} \quad t \geq \bar{t}_p$$

同理, 对 CSTR3 进行物料衡算, 可求取 CSTR3 出口浓度 C_{A3} : ①当 $t < \bar{t}_p$ 时, 由于 CSTR3 中无示踪剂, 故 $C_{A3} = 0$; ②当 $t \geq \bar{t}_p$ 时, 对 CSTR3 作物料衡算, 可得:

$$C_{A3} = \frac{C_0}{\bar{t}_3} e^{-(t - \bar{t}_p) / \bar{t}_3} \quad t \geq \bar{t}_p \quad (9)$$

$$\bar{t}_3 = \frac{f_3 V_R}{(1 - I) v_0} \quad (\text{CSTR3 平均停留时间}) \quad (10)$$

最后, 对 CSTR2、CSTR3 出口处作物料衡算, 由于该处进行的是混合过程, 则: ①当 $t < \bar{t}_p$ 时, $C_A = 0$; ②当 $t \geq \bar{t}_p$ 时, $C_A = I C_{A2} + (1 - I) C_{A3}$.

停留时间分布密度函数 $E(t)$ 的求取公式如下:

$$E(t) = \frac{C_A}{C_0} \quad (11)$$

当 $t < \bar{t}_p$ 时, $E(t) = 0$; 当 $t \geq \bar{t}_p$ 时, $E(t) =$

$$\frac{I}{\bar{t}_2} e^{-\left(\frac{t-\bar{t}_p}{\bar{t}_3}\right)} + \frac{(1-I)}{\bar{t}_3} e^{-\left(\frac{t-\bar{t}_p}{\bar{t}_3}\right)}$$

最后:

$$E(t) = \frac{I^2}{f_2 \bar{t}} e^{-\left(\frac{t-\bar{t}_p}{f_2 \bar{t}}\right)} + \frac{(1-I)^2}{(1-f_1-f_2)\bar{t}} e^{-\left(\frac{t-\bar{t}_p}{(1-f_1-f_2)\bar{t}}\right)} \quad (1-t)$$

对模型求解转化为求解一个三参数 I, f_1, f_2 的 $E(t)$ 方程, 其中, \bar{t}_p 不是独立的.

3 实验结果及模型参数求解 (The experimental results and solving model parameters)

3.1 主反应区停留时间分布测定

实验是在清水流量为 $15 \text{ L}\cdot\text{h}^{-1}$, 气体平均流量分别为 $0, 90.0, 182.1 \text{ mL}\cdot\text{h}^{-1}$ 条件下进行测定的, 示踪剂脉冲加入, 部分实验数据如表 1 所示.

表 1 不同气体流量时分布电导率随时间变化关系

Table 1 Different gas flow distribution of electrical conductivity with time changing relationship

时间/min	电导率/ ($\text{mS}\cdot\text{m}^{-1}$)	气体流量/ ($\text{mL}\cdot\text{h}^{-1}$)	时间 /min	电导率/ ($\text{mS}\cdot\text{m}^{-1}$)	气体流量/ ($\text{mL}\cdot\text{h}^{-1}$)	时间/ min	电导率/ ($\text{mS}\cdot\text{m}^{-1}$)	气体流量/ ($\text{mL}\cdot\text{h}^{-1}$)
0	0	0	0	0	90.0	0	0	182.3
2	0	0	1.7	0	89.6	1.1	0	182.0
4	0	0	3.4	0	89.2	2.2	0	182.4
6	0	0	5.1	0	90.0	3.3	0	182.7
8	0	0	6.8	0.42	90.2	4.4	3.49	181.7
10	0.34	0	7.2	5.59	90.1	5.5	5.38	181.9
10.2	5.01	0	7.6	5.89	89.8	6.6	6.15	181.6
10.4	6.44	0	8.0	5.74	90.0	7.7	5.82	182.4
10.6	6.73	0	8.4	5.61	89.9	8.8	5.47	182.6
10.8	6.77	0	8.8	5.50	90.2	9.9	5.16	182.1
11.0	6.67	0	9.2	5.27	90.0	11.0	4.91	182.3
12.5	6.09	0	10.0	5.01	89.8	12.1	4.63	182.7
14.0	5.45	0	10.8	4.71	89.9	13.2	4.38	181.8
15.5	4.84	0	11.6	4.52	90.0	14.3	4.19	181.7
17.0	4.27	0	12.4	4.32	90.5	15.4	3.97	181.6
18.5	3.78	0	13.2	4.05	89.8	16.5	3.78	182.5
20.0	3.33	0	14.0	3.78	89.6	17.6	3.54	182.3
21.5	2.91	0	14.8	3.67	90.3	18.7	3.32	182.2
23.0	2.57	0	15.6	3.45	90.4	19.8	3.14	181.9
24.5	2.25	0	16.4	3.37	89.8	20.9	2.98	181.8
26.0	1.98	0	17.2	3.04	90.7	22.0	2.79	182.2
27.5	1.73	0	18.8	2.71	90.0	26.0	2.21	181.9
29.0	1.52	0	20.4	2.40	89.8	30.0	1.71	182.0
32.0	1.14	0	22.0	2.18	90.1	34.0	1.32	182.3
35.0	0.88	0	23.6	1.91	90.7	38.0	1.03	182.2
38.0	0.65	0	25.2	1.68	90.0	42.0	0.78	181.9
41.0	0.49	0	26.8	1.52	90.3	46.0	0.59	182.4
44.0	0.34	0	28.4	1.33	89.9	50.0	0.45	181.8
47.0	0.23	0	30.0	1.15	90.3	54.0	0.33	182.0
50.0	0.15	0	33.5	0.92	90.4	58.0	0.24	182.3
53.0	0.08	0	37.0	0.72	89.9	62.0	0.17	182.6
56.0	0.03	0	40.5	0.52	90.4	66.0	0.12	181.9
59.0	0.01	0	44.0	0.40	90.0	70.0	0.05	182.2
62.0	0	0	47.5	0.31	89.8	74.0	0	181.9
			51.0	0.24	89.5			
			54.5	0.16	89.3			
			58.0	0.12	90.4			
			61.5	0.08	90.4			
			65.0	0.05	90.3			
			68.5	0.03	89.7			
			72.0	0	90.3			

根据 $E(t) = \frac{C_A}{C_0}$, $C_0 = \int_0^\infty C_A dt$, 各时间点的 $E(t)$

值如表 2 所示.应用非线性最小二乘法求解,不同气
体流量时的模型参数及方程如表 3 所示.

表 2 停留时间分布密度函数 $E(t)$ 随时间变化关系

Table 2 Residence time distribution density function $E(t)$ changing with time

时间 /min	$E(t)$ /实验值	$E(t)$ /计算值	时间 /min	$E(t)$ /实验值	$E(t)$ /计算值	时间 /min	$E(t)$ /实验	$E(t)$ /计算值
0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	1.7	0	0	1.1	0	0
4	0	0	3.4	0	0	2.2	0	0
6	0	0	5.1	0	0	3.3	0	0
8	0	0	6.8	4.92×10^{-3}	0	4.4	28.97×10^{-3}	0
10	3.92×10^{-3}	0	7.2	65.45×10^{-3}	0	5.5	44.66×10^{-3}	0
10.2	57.78×10^{-3}	0	7.6	68.96×10^{-3}	66.02×10^{-3}	6.6	51.06×10^{-3}	51.32×10^{-3}
10.4	74.27×10^{-3}	0	8.0	67.20×10^{-3}	64.26×10^{-3}	7.7	48.32×10^{-3}	48.49×10^{-3}
10.6	77.61×10^{-3}	0	8.4	65.68×10^{-3}	62.54×10^{-3}	8.8	45.41×10^{-3}	45.81×10^{-3}
10.8	78.07×10^{-3}	78.33×10^{-3}	8.8	64.39×10^{-3}	60.88×10^{-3}	9.9	42.84×10^{-3}	43.28×10^{-3}
11.0	76.92×10^{-3}	77.09×10^{-3}	9.2	61.70×10^{-3}	59.26×10^{-3}	11.0	40.76×10^{-3}	40.89×10^{-3}
12.5	70.23×10^{-3}	68.38×10^{-3}	10.0	58.66×10^{-3}	56.14×10^{-3}	12.1	38.44×10^{-3}	38.64×10^{-3}
14.0	62.85×10^{-3}	60.68×10^{-3}	10.8	55.14×10^{-3}	53.20×10^{-3}	13.2	36.36×10^{-3}	36.51×10^{-3}
15.5	55.82×10^{-3}	53.87×10^{-3}	11.6	52.92×10^{-3}	50.41×10^{-3}	14.3	34.78×10^{-3}	34.50×10^{-3}
17.0	49.24×10^{-3}	47.83×10^{-3}	12.4	50.58×10^{-3}	47.78×10^{-3}	15.4	32.96×10^{-3}	32.60×10^{-3}
18.5	43.59×10^{-3}	42.49×10^{-3}	13.2	47.42×10^{-3}	45.28×10^{-3}	16.5	31.38×10^{-3}	30.80×10^{-3}
20.0	38.40×10^{-3}	37.75×10^{-3}	14.0	44.26×10^{-3}	42.91×10^{-3}	17.6	29.39×10^{-3}	29.11×10^{-3}
21.5	33.56×10^{-3}	33.56×10^{-3}	14.8	42.97×10^{-3}	40.67×10^{-3}	18.7	27.56×10^{-3}	27.51×10^{-3}
23.0	29.64×10^{-3}	29.83×10^{-3}	15.6	40.39×10^{-3}	38.56×10^{-3}	19.8	26.07×10^{-3}	25.99×10^{-3}
24.5	25.95×10^{-3}	26.53×10^{-3}	16.4	39.45×10^{-3}	36.55×10^{-3}	20.9	24.74×10^{-3}	24.56×10^{-3}
26.0	22.83×10^{-3}	23.60×10^{-3}	17.2	35.59×10^{-3}	34.65×10^{-3}	22.0	23.16×10^{-3}	23.21×10^{-3}
27.5	19.95×10^{-3}	21.00×10^{-3}	18.8	31.73×10^{-3}	31.15×10^{-3}	26.0	18.35×10^{-3}	18.90×10^{-3}
29.0	17.53×10^{-3}	18.70×10^{-3}	20.4	28.10×10^{-3}	28.01×10^{-3}	30.0	14.20×10^{-3}	15.39×10^{-3}
32.0	13.15×10^{-3}	14.83×10^{-3}	22.0	25.52×10^{-3}	25.19×10^{-3}	34.0	10.96×10^{-3}	12.54×10^{-3}
35.0	10.15×10^{-3}	11.77×10^{-3}	23.6	22.36×10^{-3}	22.67×10^{-3}	38.0	8.55×10^{-3}	10.22×10^{-3}
38.0	7.50×10^{-3}	9.35×10^{-3}	25.2	19.67×10^{-3}	20.40×10^{-3}	42.0	6.48×10^{-3}	8.33×10^{-3}
41.0	5.65×10^{-3}	7.43×10^{-3}	26.8	17.80×10^{-3}	18.36×10^{-3}	46.0	4.90×10^{-3}	6.79×10^{-3}
44.0	3.92×10^{-3}	5.92×10^{-3}	28.4	15.57×10^{-3}	16.53×10^{-3}	50.0	3.74×10^{-3}	5.54×10^{-3}
47.0	2.65×10^{-3}	4.71×10^{-3}	30.0	13.46×10^{-3}	14.89×10^{-3}	54.0	2.74×10^{-3}	4.52×10^{-3}
50.0	1.73×10^{-3}	3.76×10^{-3}	33.5	10.77×10^{-3}	11.86×10^{-3}	58.0	1.99×10^{-3}	3.68×10^{-3}
53.0	0.923×10^{-3}	2.99×10^{-3}	37.0	8.43×10^{-3}	9.45×10^{-3}	62.0	1.41×10^{-3}	3.01×10^{-3}
56.0	0.346×10^{-3}	2.39×10^{-3}	40.5	6.09×10^{-3}	7.55×10^{-3}	66.0	0.99×10^{-3}	2.45×10^{-3}
59.0	0.115×10^{-3}	1.91×10^{-3}	44.0	4.68×10^{-3}	6.03×10^{-3}	70.0	0.42×10^{-3}	2.01×10^{-3}
62.0	0	1.53×10^{-3}	47.5	3.63×10^{-3}	4.83×10^{-3}	74.0	0	1.63×10^{-3}
			51.0	2.81×10^{-3}	3.87×10^{-3}			
			54.5	1.87×10^{-3}	3.11×10^{-3}			
			58.0	1.40×10^{-3}	2.49×10^{-3}			
			61.5	0.94×10^{-3}	2.01×10^{-3}			
			65.0	0.59×10^{-3}	1.61×10^{-3}			
			68.5	0.35×10^{-3}	1.31×10^{-3}			
			72.0	0	1.05×10^{-3}			

表3 不同气体流量时流动模型参数计算值

气体流量 $v_g /$ ($\text{mL} \cdot \text{h}^{-1}$)	f_1	f_2	f_3	I
0	0.54	0.11	0.35	0.22
90.0	0.38	0.40	0.22	0.43
182.1	0.33	0.66	0.01	0.63

注: $f_1 = f_p = 1 - f_2 - f_3$.

$$E(t) = \begin{cases} 0 & t < 10.8 \\ 0.022\exp[-0.1(t - 10.8)] + 0.05633\exp[-0.07222(t - 10.8)] & t \geq 10.8 \end{cases} \quad (12)$$

$$E(t) = \begin{cases} 0 & t < 7.6 \\ 0.02327\exp[-0.05411(t - 7.6)] + 0.04275\exp[-0.075(t - 7.6)] & t \geq 7.6 \end{cases} \quad (13)$$

$$E(t) = \begin{cases} 0 & t < 6.6 \\ 0.03037\exp[-0.04821(t - 6.6)] + 0.02095\exp[-0.05663(t - 6.6)] & t \geq 6.6 \end{cases} \quad (14)$$

3.2 内循环厌氧反应器模拟

3.2.1 内循环厌氧反应器反应过程模型的建立及验证

1) 反应器反应过程模型建立

根据以上停留时间分布的特点,厌氧反应器由主、次反应区组成,因此,可用图4中的组合模型模

拟反应器反应过程行为.图4所示组合模型中,根据停留时间分布规律,1、2、3拟合的是厌氧反应器主反应区;次反应区由中间回流区和环隙区构成,中间回流区可作为平推流处理,环隙区由于有大量产物气体流过,可作为全混区处理,所以反应器次反应区可由4、5并联进行拟合.

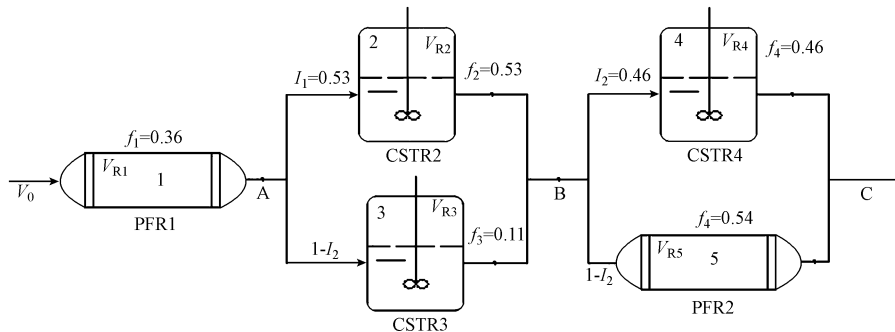


图4 反应器反应过程模型组合示意图

Fig.4 Schematic diagram of reactor process model

模型中各参数的确定:针对本反应器,实际反应过程中生成的气量在 $90 \sim 180 \text{ mL} \cdot \text{h}^{-1}$ 之间,因此,模型中主反应区各参数取其平均值,具体如下: $f_1 = 0.36, f_2 = 0.53, f_3 = 0.11, I_1 = 0.53$.

次反应区流量分率为:

$$I_2 = \frac{V_{R4}}{V_{R5}} = \frac{2.44}{2.44 + 2.86} \approx 0.46$$

各反应区有效体积 V_{Ri} 的确定:总污泥加入量为 5 L ,上层即次反应区污泥所占分率按 0.35 计算,则: $V_{R1} + V_{R2} + V_{R3} = 3.25 \text{ L}, V_{R1} = 1.17 \text{ L}, V_{R2} = 1.7225 \text{ L}, V_{R3} = 0.3575 \text{ L}, V_{R4} + V_{R5} = 1.75 \text{ L}, V_{R4} = V_4 / (V_4 + V_5) = 0.8057 \text{ L}, V_{R5} = 0.9443 \text{ L}$.

2) 模型验证

为验证上述模型是否正确,进行了3组不同初始浓度操作状态的实验,当厌氧反应器操作稳定后,即在一定时间能气体流量基本不变,此时,操作参数分别为:废液体积流量 $v_{0L} = 15 \text{ L} \cdot \text{h}^{-1}$,温度 $T = 35 \text{ }^\circ\text{C}$,废液初始 $\text{COD } C_{S0} = 3.3840, 3.5326, 3.8729 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$,由前期实验所得动力学方程为:

$$-r_s = \frac{0.011193C_s}{3.3286 + C_s} \quad (15)$$

$$r_{p\text{CH}_4} = \frac{29.3620\exp\left(-\frac{27403.28}{RT}\right)C_s}{3.3286 + C_s} \quad (16)$$

$$r_{pCO_2} = \frac{183.3649 \exp\left(-\frac{32831.40}{RT}\right) C_s}{3.3286 + C_s} \quad (17)$$

式中, C_s 为反应器中废液浓度 ($g \cdot L^{-1}$), $-r_s$ 为废液 COD 消耗速率 ($g \cdot min^{-1} \cdot L^{-1}$), r_{pCH_4} 为甲烷生成速率

($g \cdot min^{-1} \cdot L^{-1}$), r_{pCO_2} 为二氧化碳生成速率 ($g \cdot min^{-1} \cdot L^{-1}$), 模拟计算了反应器单程转化过程, 主、次反应区出口即 B、C 两点处计算值如表 4 所示. 以基质初始浓度 $C_{S0} = 3.3840 g \cdot L^{-1}$ 为例, 实验数据及处理如表 5 所示.

表 4 主、次反应区出口处 B、C 两点状态数据

Table 4 The B, C two state data at main and secondary reaction zone outlet

$C_{S0}/(g \cdot L^{-1})$	B 点		C 点		
	$C_{SB}/(g \cdot L^{-1})$	$C_{SC}/(g \cdot L^{-1})$	$F_{CH_4}/(g \cdot min^{-1})$	$F_{CO_2}/(g \cdot min^{-1})$	$V_{gC}/(mL \cdot h^{-1})$
3.384	3.3113	3.282	2.13×10^{-3}	2.40×10^{-4}	210.09
3.5326	3.4584	3.4285	2.18×10^{-3}	2.45×10^{-4}	214.72
3.8729	3.7953	3.764	2.27×10^{-3}	2.56×10^{-4}	224.39

表 5 验证实验各点状态数据一览

Table 5 A view on states of B and C point in confirmatory experiment

时间/h	B 点		C 点		
	$C_{SB}/(g \cdot L^{-1})$	$C_{SC}/(g \cdot L^{-1})$	气体体积流量/ ($mL \cdot h^{-1}$)	CH ₄ 体积分数 y_{CH_4}	CO ₂ 体积分数 y_{CO_2}
4	3.2603	3.1982	254.87	76.67%	3.65%
8	2.9793	2.8638	242.19	79.61%	3.41%
平均值	3.0698	3.0310	248.03	78.14%	3.53%

CH₄ 体积流量 $v_{CH_4实}$ 为 $193.81 mL \cdot h^{-1}$, CH₄ 质量流量 $F_{CH_4实}$ 为 $2.045 \times 10^{-3} g \cdot min^{-1}$. 同理, 可计算 CO₂ 体积流量、质量流量分别为 $8.75 mL \cdot h^{-1}$ 、 $2.54 \times 10^{-4} g \cdot min^{-1}$. 误差按 (实验值 - 计算值) / 实验值 $\times 100\%$ 计算, 可知本组 B 点基质浓度 C_{SB} 误差最大, 为 7.86%.

由表中数据可见: 不同时刻反应器出口 C 点的气体体积流量 v 大于模拟计算时的体积流量 v_{gC} , 其原因可能是该验证实验时间不够长, 系统中存在一定的 N₂, 同时反应过程中生成其它气体所致. 其余两组数据计算依此类推, 最后得到不同浓度时, C 点出口处 CH₄ 体积流量最大误差为 9.67%, CO₂ 体积流量最大误差为 8.53%, 可见所建立的组合模型能够

反映反应器实际操作状况.

3.2.2 内循环厌氧反应器模拟计算 根据以上反应过程模型, 模拟了初始 COD、温度变化对厌氧反应器状态的影响.

1) 初始 COD 变化对反应器操作状态影响的模拟研究

操作参数为: 废液体积流量 $v_{OL} = 15 L \cdot h^{-1}$, 温度 35 °C, 改变 COD 初始值, B、C 两处模拟数据如表 6 所示. 由表 6 中数据可知, 当温度一定时, 随着基质初始浓度的增高, B、C 两处基质浓度也随之升高, 产物 CH₄、CO₂ 的质量流量也升高.

表 6 反应器出口处 B、C 两点状态随基质浓度变化关系

Table 6 The relationship between the reactor outlet B, C two state changes with the concentration of substrate

$C_{S0}/(g \cdot L^{-1})$	B 点				C 点			
	$C_{SB}/(g \cdot L^{-1})$	$F_{CH_4}/(g \cdot min^{-1})$	$F_{CO_2}/(g \cdot min^{-1})$	$v_{gB}/(mL \cdot h^{-1})$	$C_{SC}/(g \cdot L^{-1})$	$F_{CH_4}/(g \cdot min^{-1})$	$F_{CO_2}/(g \cdot min^{-1})$	$v_{gC}/(mL \cdot h^{-1})$
3.0	2.9317	1.31×10^{-3}	1.48×10^{-4}	129.36	2.9043	2.01×10^{-3}	2.26×10^{-4}	198.21
3.2	3.1294	1.35×10^{-3}	1.52×10^{-4}	133.70	3.1010	2.07×10^{-3}	2.34×10^{-4}	204.79
3.4	3.3272	1.39×10^{-3}	1.56×10^{-4}	137.08	3.2979	2.13×10^{-3}	2.40×10^{-4}	210.54
3.6	3.5250	1.43×10^{-3}	1.61×10^{-4}	141.12	3.4948	2.20×10^{-3}	2.47×10^{-4}	216.88
3.8	3.7230	1.47×10^{-3}	1.65×10^{-4}	144.84	3.6920	2.25×10^{-3}	2.54×10^{-4}	222.46
4.0	3.9212	1.50×10^{-3}	1.69×10^{-4}	148.40	3.8894	2.31×10^{-3}	2.59×10^{-4}	227.94

2) 反应温度变化对反应器操作状态影响模拟研究

操作参数为: 废液体积流量 $v_{0L} = 15 \text{ L} \cdot \text{h}^{-1}$, COD 初始值 $C_{S0} = 3.40 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$, 改变温度, B、C 两处模拟数据如表 7 所示。由表 7 中数据可知, 在基质初始浓度一定时, 随着温度的升高, B、C 两处的基质浓度不

变, 这主要是由于在该温度范围内, 基质消耗活化能很低, 以致消耗速率几乎不随温度变化而形成的结果; 但产物 CH_4 、 CO_2 的质量流量随温度的升高而升高, 同时 CO_2 的增加速率要快于 CH_4 , 这主要是由于 CO_2 生成活化能高于 CH_4 , 故其生成速率对温度更为敏感。

表 7 反应器出口处 B、C 两点状态随基质温度变化关系

Table 7 The relationship between the reactor outlet B, C two state changes with the temperature of matrix

T/K	B 点				C 点			
	$C_{SB}/$ ($\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$)	$F_{\text{CH}_4}/$ ($\text{g} \cdot \text{min}^{-1}$)	$F_{\text{CO}_2}/$ ($\text{g} \cdot \text{min}^{-1}$)	$v_{gB}/$ ($\text{mL} \cdot \text{h}^{-1}$)	$C_{SC}/$ ($\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$)	$F_{\text{CH}_4}/$ ($\text{g} \cdot \text{min}^{-1}$)	$F_{\text{CO}_2}/$ ($\text{g} \cdot \text{min}^{-1}$)	$v_{gC}/$ ($\text{mL} \cdot \text{h}^{-1}$)
304.15	3.3272	1.21×10^{-3}	1.32×10^{-4}	117.38	3.2979	1.85×10^{-3}	2.03×10^{-4}	180.27
306.15	3.3272	1.29×10^{-3}	1.44×10^{-4}	126.91	3.2979	1.99×10^{-3}	2.21×10^{-4}	194.92
308.15	3.3272	1.39×10^{-3}	1.56×10^{-4}	137.08	3.2979	2.13×10^{-3}	2.40×10^{-4}	210.54
310.15	3.3272	1.46×10^{-3}	1.70×10^{-4}	144.86	3.2979	2.23×10^{-3}	2.61×10^{-4}	221.68
312.15	3.3272	1.59×10^{-3}	1.84×10^{-4}	159.49	3.2979	2.45×10^{-3}	2.83×10^{-4}	244.96

4 结论 (Conclusions)

1) 通过对反应器主反应区停留时间分布的考察, 主反应区流型可以用一平推流区与两个并联的全混区进行串联组成, 各区所占体积分率随反应过程中所产气体流量不同而不同, 随着气体流量的增大, 平推流区所占体积分率减小。

2) 次反应区由平推流区和全混区并联组合而成, 整个厌氧反应器由主反应区和次反应区串联组合而成, 根据实验数据可知, C 点出口处 CH_4 体积流量最大误差为 9.67%, 在可允许的范围内, 说明该组合模型较好地模拟了反应器的实际状态。

3) 采取单因素分析方法, 模拟了基质初始 COD 和温度变化对反应器出口状态的影响, 发现产物 CH_4 、 CO_2 的质量流量随基质浓度、温度的升高而升高; 在 304.15~312.15 K 范围内, 温度的变化对出口

处基质浓度的影响不大。

参考文献 (References):

- Diamantis V I, Aivasidis A. 2007. Comparison of single- and two-stage UASB reactors used for anaerobic treatment of synthetic fruit wastewater[J]. *Enzyme and Microbial Technology*, 42(1): 6-10
- 季军远, 邢雅娟, 郑平. 2012. 分段组合式厌氧生物反应器流态特性[J]. *化工学报*, 63(10): 3045-3051
- 王卫京, 陈淑花, 陈理, 等. 2010. 侧伸搅拌厌氧反应器流场的数值模拟[J]. *大连大学学报*, 31(5): 34-35
- 王卫京, 陈理. 2011. 高浓度厌氧反应器流场的数值模拟[J]. *大连大学学报*, 32(3): 33-35
- 张良佳, 邵迪. 2011. 流化床厌氧反应器流化及反应特性研究[J]. *环境工程*, 29(2): 20-23; 47
- 张倩倩, 沈李东, 郭立新, 等. 2013. UASB 反应器模型的研究进展[J]. *科技通报*, 29(1): 174-180
- 邹尧, 杨忠林, 韩萍芳, 等. 2012. 污泥分级分相厌氧反应器水力特性研究[J]. *高校化学工程学报*, 26(5): 781-786