

紫外消毒数值模拟及生物验证

李继, 张艳, 董文艺

(哈尔滨工业大学 深圳研究生院, 518055 广东 深圳, lij98@tsinghua.org.cn)

摘要: 为建立紫外消毒系统优化方法, 基于光强分布、流场分布、当量剂量求解, 开展紫外消毒的数值模拟, 针对腔体式紫外消毒反应器, 在 80%~95% 透光率和 240~600 L/h 流量条件下对模型进行生物验证. 结果表明: 该模型能够较准确地预测消毒效果, 当量剂量模拟结果与实验结果在不同条件下相差 3%~12%. 有效剂量随处理流量的增加而降低; 消毒效率随溶液透光率的减小而降低, 但是随着流量的增加, 透光率影响降低, 高流量 (600 L/h) 下, 透光率对消毒效率影响小于 3%. 流场的可视化设计优化工作提供了分析依据, 反应器内前段, 反应器内壁处光强小而流速大, 是影响消毒效率的原因. 数值模型为系统优化设计和剂量同步提供了依据.

关键词: 计算流体力学 (CFD); 柱源模型; 当量剂量; 生物验证

中图分类号: TP242

文献标志码: A

文章编号: 0367-6234(2011)12-0077-05

Numerical simulation of UV disinfection and bioassay validation

LI Ji, ZHANG Yan, DONG Wen-yi

(Harbin Institute of Technology Shenzhen Graduate School, 518055 Shenzhen, Guangdong, China, lij98@tsinghua.org.cn)

Abstract: To establish an optimization method for UV systems, numerical models were developed based on UV intensity field, flow field and equivalent reduction dose (RED). The model was verified using bioassay on the condition of the UVT (80%~95%) and the flow rate (240~600 L/h) with an annular UV reactor. Results showed that the model predicted the disinfection efficiencies with good accuracy. RED from simulations and experiments under different conditions had a difference of 3%~12%. RED increased with the increase of flow rate and decrease of the transmittance. However, transmittance had merely a slight impact, about 3% on RED of high flow (600 L/h). Visualization images showed that near the inlet of the reactor, the UV intensity was weak while the velocity was large adjacent to the wall, which had a negative effect on disinfection efficiency. This numerical model provided a basis for UV system optimization and dose synchronization.

Key words: computational fluid dynamics (CFD); cylinder model; equivalent reduction dose (RED); bioassay

由于紫外线原位消毒特点, 其效率严重依赖水的流态与紫外光强分布的耦合程度, 水力条件的细微差异可能致微生物灭活率数量级的变化, 因此, 紫外消毒系统优化设计对于保证和提高消

毒效率极其重要. 传统优化设计采用生物实验来实现, 需要大量加工和生物验证工作, 过程繁杂, 费用高昂. 随着计算机技术的快速发展, 基于计算流体力学 (Computational Fluid Dynamics, CFD) 的数值模拟成为优化研究新方法, 借助高性能计算机, 利用 CFD 软件, 动态模拟紫外杀菌并实现设备结构和操作参数的优化^[1-3].

紫外消毒模拟的关键在于模型的准确性和可靠性. 消毒效率对设备构造非常敏感, 因此, 受构造影响的光强分布与流场的准确模拟就极为重要. 本研究以腔体式紫外消毒反应器为对象, 建立

收稿日期: 2010-07-26.

基金项目: 国家水体污染控制与治理科技重大专项 (2008ZX07423-04); 国家科技支撑计划项目 (2006BAB17B04, 2006BAB17B06); 深圳市科技计划项目 (SY200806260019A).

作者简介: 李继 (1973—), 男, 博士, 副教授;
董文艺 (1967—), 男, 教授, 博士生导师.

了紫外消毒数值模拟方法和模型,采用生物实验对模型进行了验证.

1 实 验

1.1 研究对象

采用某国际紫外设备厂商的腔体式紫外消毒反应器作为研究对象.图 1 和表 1 为本反应器示意图及主要参数.

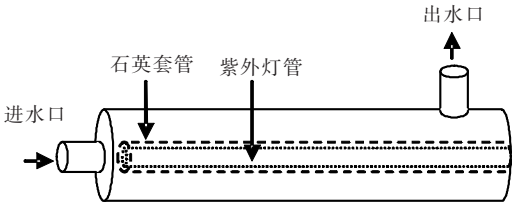


图 1 反应器简图
表 1 反应器主要参数

参数	数值	参数	数值
反应器长度/m	0.28	石英套管直径/m	0.02
灯管有效长度/m	0.26	反应器内径/m	0.06
不锈钢紫外反射率	0.95	有效输出功率/W	10

1.2 模拟方法及工具

紫外消毒的数值模拟方法分 3 个主要步骤是:水力模拟,即选择适当的计算流体动力学模型和参数,建立 CFD 模型;光强分布模拟,即根据光

强分布理论,建立光强分布模型;有效剂量模拟,即基于 CFD 模型与光强分布模型的耦合,利用消毒动力学参数,计算有效剂量.

1.2.1 水力模拟方法及工具

水力模拟采用 CFD 软件 Fluent,基于有限元体积法,将流场网格化,选择恰当的流体模型,利用 Fluent 的求解器求解内部流场.网格划分不但要考虑其精细度提高模拟的准确度,又要避免由于网格过于复杂而过多地消耗计算机资源.本研究中反应器采用结构型网格,总网格数为 7.85 万个,平均体积 $9.3\times10^{-9}\text{m}^3$.反应器内流体流动处于湍流状态,故采用标准 $k-\varepsilon$ 模型.其余相关参数根据实际条件通过分析、计算来确定.

1.2.2 光强模拟方法及工具

光强模拟可采用线源、柱源等模型.线源模型计算多采用多点源叠加近似法(MPSS),把一个线光源分成反应器轴上的一系列等空间点源来进行计算^[4].Blatchley 等^[5]引入线源综合模型(LSI)来扩展 MPSS 模型.柱源模型假设灯管由无限多沿轴向的柱状微元叠加而成,每个微元再划分为无限多的扇形亚微元,对亚微元进行积分即得到光强分布^[6].紫外灯管为圆柱体,其直径与反应器尺寸相比不宜忽略,因此,本研究选择柱源模型,公式如下:

$$E = \frac{P}{4\pi^2 L} \int_{x_0}^{x_1} \int_{\theta_0}^{\pi-\theta_0} \frac{\exp(-\lambda\sqrt{(x-x_p)^2 - 2r\sin\theta\sqrt{y_p^2+z_p^2} + r^2 + y_p^2 + z_p^2})}{(x-x_p)^2 - 2r\sin\theta\sqrt{y_p^2+z_p^2} + r^2 + y_p^2 + z_p^2} d\theta dx.$$

(1)

式中: P 为灯管功率; x_0 为灯管轴向起点坐标; x_1 为灯管轴向始点坐标; λ 为溶液平均透光率; r 为灯管半径; L 为灯管长度.

反应器内壁的反射对光强分布影响较大,本模型将式(1)光强与反射产生的光强进行叠加得到反应器内的光强分布.

光强分布计算采用 Fluent 的用户自定义函数(UDF),应用 C 语言编程,动态链接到 Fluent 求解器上.用户通过 UDF 可实现自定义计算、模块内部数据交换,解决 Fluent 的标准模块不能解决的问题.

1.2.3 当量剂量模拟方法及工具

对于各点紫外辐射剂量相等的消毒系统,微生物灭活遵循 Chick-Watson 公式,即

$$\lg(N/N_0) = a \cdot D + b.$$

式中: D 为紫外剂量 mJ/cm^2 ; a, b 为芽孢对紫外线的敏感系数,由紫外剂量和灭活率对应关系求得; N_0 为未经紫外线照射水样中的微生物个数; N 为经紫外线照射后水样中剩余微生物个数.

当系统内紫外剂量分布不均,定义当量剂量(reduction-equivalent dose, D_{RE} ,或有效剂量),有

$$\lg(\bar{N}/N_0) = a \cdot D_{\text{RE}} + b.$$

式中 $\bar{N}/N_0$ 为微生物平均存活率.

相同测试条件下, D_{RE} 越大, $\bar{N}/N_0$ 越小,消毒系统效率越高,因此, D_{RE} 通常作为消毒系统的评价参数. D_{RE} 根据微生物平均存活率计算,即

$$D_{\text{RE}} = [\lg(\bar{N}/N_0) - b]/a.$$

D_{RE} 取决于剂量分布形式和微生物的消毒曲线.剂量分布越不均匀或微生物对紫外越敏感, D_{RE} 就越小^[7].

生物试验确定 D_{RE} 的过程耗时、成本高,而模拟方法可快速获得 D_{RE} .

本文中 D_{RE} 模拟采用 Fluent 的 DPM 模型,该模型基于拉格朗日方法,可追踪粒子的运动轨迹.一个微小粒子从进口进入反应器,通过 DPM 模型追踪每经过一个微小时间步长 Δt ,粒子的起点和终点坐标及该两点坐标所处网格的平均光强 I ,得到该时间步长内粒子受到的紫外辐射剂量($I \cdot$

Δt),从进口追踪到出口,累计所有步长内的剂量,可得该粒子受到的总紫外辐射剂量,进而可计算该粒子代表的微生物的存在率^[8].

从进水断面均匀投加 1 000 个粒子,可计算每个粒子代表的微生物的存活率,由平均存在率可获得当量剂量.当量剂量的计算通过 UDF 编程实现.

1.3 生物验证实验装置及方法

1.3.1 消毒动力学参数的确定方法

经过比选采用枯草芽孢杆菌(ATCC9372,广东省微生物菌种保藏中心)作为验证微生物开展消毒实验.

消毒动力学参数的确定采用文献[10]中生物验证的标准方法和准则.通过检测光照前后水样中的芽孢数量,计算不同紫外辐照剂量下的芽孢灭活率,作图得出紫外剂量和灭活率的对应关系,进一步得到枯草芽孢的灭活动力学公式,即

$$\lg(N/N_0) = -0.0654 \cdot D + 0.3386,$$
$$R^2 = 0.9893.$$

1.3.2 试验装置及检测方法

试验装置如图 2 所示.在原水水箱中投加一定量的咖啡溶液,开启回流泵使咖啡溶液与水箱中的水混合均匀,通过投加咖啡溶液来改变水的透光率(T_{UV}),然后再向水箱中投加配制好的枯草芽孢杆菌溶液,开启回流泵混匀,通过调节阀门使流量达到设计值后取样,在紫外线消毒设备进水和出水取样口取样,检测枯草芽孢杆菌的存活率,计算当量剂量.

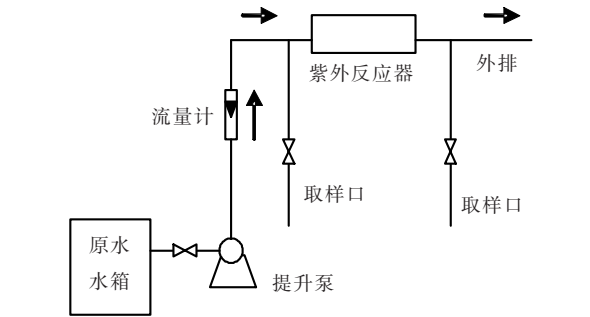


图 2 实验装置图

为了保证取样的准确性,对应每个流量值的出水均取 3 个平行样.每个样品至少取 3 个稀释倍数,每个稀释倍数取 4 个平行.为了避免水样和空气中其他细菌的感染,玻璃器皿等采用高压蒸汽灭菌 121 ℃ 30 min;取样后,为避免配水桶及管道内杂菌感染,水样置于 80 ℃ 水浴锅中 20 ~ 25 min;相应的微生物实验在无菌操作台完成^[10].

2 消毒模拟结果及分析

2.1 光强

图 3 为反应器内中心径向剖面 and 轴向剖面光强分布云图.反应器内中心光强分布不均匀.光强沿灯管中心向容器壁递减,近灯管处光强达 85.7 mW/cm²,近壁面处光强只有 30 mW/cm²;出口处光强较弱,小于 10 mW/cm².

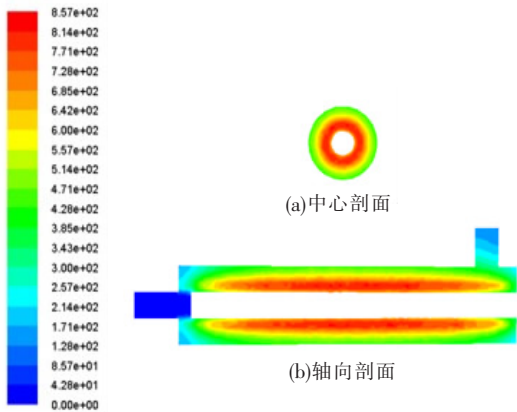


图 3 反应器中心径向及轴向剖面光强分布图

对于连续流反应器,水力条件不变的情况下,微生物经过消毒区域时接受的紫外辐照剂量主要决定于光强分布.反应器中光强均匀分布对提高紫外消毒设备的消毒效率有重要意义.

2.2 流态

采用标准 $k-\varepsilon$ 湍流模型模拟反应器内 6 个流量下(240~600 L/h)的流态.图 4 为流量 600 L/h 时反应器径向剖面及轴向剖面速度场云图.

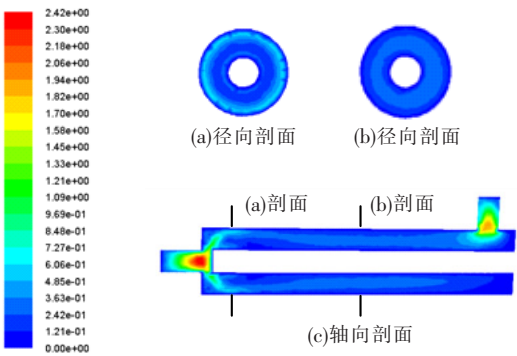


图 4 反应器径向及轴向剖面速度分布图

由图 4 可以看出,进水口附近水流遇到紫外灯管流速增大,随后沿径向流向反应器内壁,呈现内壁附近流速高于灯管附近流速的情况.在径向剖面(a)处,灯管附近速度约为 0.3 m/s,沿径向先增大到靠近内壁的 0.4 m/s.到径向剖面(b)处,速度沿径向分布趋于均匀,在 0.25 ~ 0.35 m/s,靠近灯管处流速略高.从轴向剖面图可

以看出,进口处和出口处速度变化较快,速度梯度较大,进口处最大流速达 2.4 m/s,出口处最大速度约为 1.8 m/s,在反应器内部流速较为平均,在 0.2~0.3 m/s 内.

在同一流量下,当紫外光强分布确定时,反应器消毒效率主要决定于流场与光强分布的耦合.若光强较大区域流速较大,而光强较小区域流速较小,可使不同粒子接受的剂量趋于均匀,从而提高整体的消毒效率.流场的可视化设计优化工作提供了分析依据.比较图 3,4 可以看出,反应器内沿水流方向的中后段光强与流场耦合较好,而在前段反应器内壁处光强小而流速大,降低了消毒效率.

2.3 当量剂量

分别在不同流量、不同透光率下对当量剂量进行了模拟,结果见图 5.

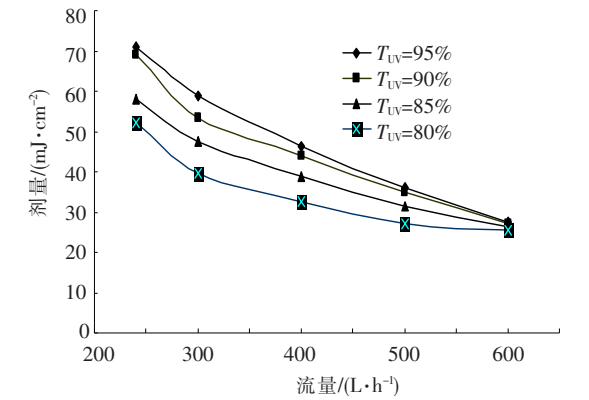


图 5 不同透光率下流量-剂量关系图

由图 5 可以看出,透光率是当量剂量的重要影响因素之一,随着透光率增加,当量剂量呈增大趋势,而且流量越小影响越显著.如流量为 300 L/h 时,透光率由 80% 增大到 95%,紫外剂量由 39.7 mJ/cm² 增大到 63.5 mJ/cm²,增幅达 60%.值得注意的是,高流量下透光率的影响不明显,流量为 600 L/h,剂量差异小于 3%.

相同透光率下,流量减小,则平均光照时间(即反应器平均停留时间)增加,当量剂量随之增加.当平均光照时间为 4.2 s(流量 600 L/h),透光率 95% 和 80% 对应的当量剂量接近,分别为 29.4 和 27.4 mJ/cm²;当平均光照时间增至 10.5 s(流量 240 L/h),增加 150%,透光率 95% 对应的当量剂量同比例增加(148%),达 72.8 mJ/cm²,而透光率 80% 对应的当量剂量仅增加 91%,为 52.3 mJ/cm².

3 生物验证结果及分析

对不同透光率(80%~95%)、不同流量(240~600 L/h)进行了 20 组生物验证实验.结果

表明,生物验证剂量与流量乘幂关系趋于一致,透光率为 80% 时拟合方程为 $y = 52.876x^{-0.4581}$, $R^2 = 0.99$,在其他透光率下, R^2 均大于 0.95.

生物验证剂量与模拟的当量剂量的对比关系见图 6.

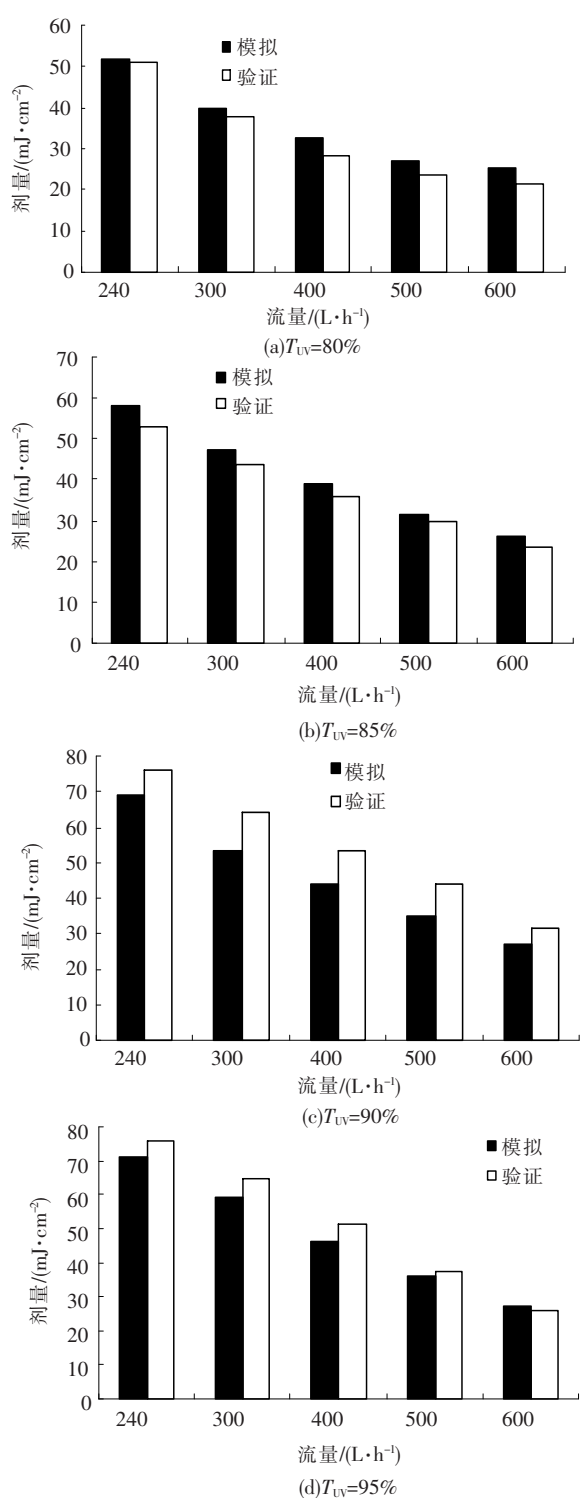


图 6 不同 T_{UV} 下模拟剂量与实验剂量对比

由图 6 可以看出,模拟结果与实验结果具有相同的趋势,在所有流量及透光率下吻合程度较高,误差范围在 3%~12%.生物验证实验验证了

透光率对剂量的影响,低流量下透光率对剂量影响显著,而在高流量下(600 L/h),透光率无明显影响,模拟及实验的剂量范围都在 21 ~ 26 mJ/cm².

当量剂量模拟与反应器水力条件、光强分布有关,模拟结果受灯管效率、模型选择、模型的简化等因素的影响,而生物验证试验的精度也与操作有关,因此,两者难以精确相等.但是,通过对紫外消毒系统模型的精心构建,可以对趋势进行准确预测,计算结果也相对比较准确,从而为紫外消毒系统的优化设计提供强有力的工具.由于模型考虑了流量、透光率等主要水质指标,可为实际操作提供剂量同步的依据,即根据水质参数调节紫外灯功率保证当量剂量不变,从而在保证消毒效率的前提下降低能耗.

4 结 论

1)模拟的当量剂量与实验结果趋势相符,数值较为吻合,误差范围为 3% ~ 12%,说明该模型可以较准确地计算反应器紫外消毒效率.

2)模拟和验证实验均表明,同一透光率下,有效剂量随处理流量的增加而降低,呈乘幂的关系;透光率是影响剂量的因素之一,在低流量下透光率对剂量影响显著,但在高流量下(600 L/h),透光率对剂量无明显影响.

3)流场的可视化为设计优化工作提供了分析依据.反应器内沿水流方向的中后段光强与流场耦合较好,而在前段,反应器内壁处光强小而流速大,降低了消毒效率.

4)通过 CFD 模拟的方法,可以对反应器结构、操作参数等进行改进,是进行紫外消毒系统优化设计和剂量同步的强有力工具.

参考文献:

[1] WOLS B A, SHAO L. Evaluation of experimental techniques to validate numerical computations of the hydraulics inside a UV bench-scale reactor[J]. Chemical Engineering Science, 2010,65(15): 4491-4502.

[2] ZHAO X, ALPERT S M, DUCOSTE J J. Assessing the impact of upstream hydraulics on the dosedistribution of ultraviolet reactors using fluorescence microspheres and computational fluid dynamics[J]. Environmental Engineering Science, 2009,26(5): 947-959.

[3] NAUNOVIC Z, PENNELL K G, BLATCHLEY E R. Development and performance of a fluence rate distribution model for a cylindrical excimer lamp[J]. Environmental Science and Technology, 2008,42(5): 1605-1614.

[4] BOLTON J R. Calculation of ultraviolet fluence rate distributions in an annular reactor: significance of refraction and reflection [J]. Water Research, 2000,34(13): 3315-3324.

[5] BLATCHLEY E R, DO-QUANG Z, JANEX M L, et al. Process modeling of ultraviolet disinfection [J]. Water Science and Technology, 1998,38(6): 63-69.

[6] ELYASI S, TAGHIPOUR F. Simulation of UV photoreactor for water disinfection in Eulerian framework [J]. Chemical Engineering Science, 2006,61(14): 4741-4749.

[7] CABAJ A, SOMMER R, SCHOENEN D. Biodosimetry: model calculations for UV water disinfection devices with regard to dose distributions[J]. Water Research, 1996, 30(4): 1003-1009.

[8] HO C K. Evaluation of reflection and refraction in simulations of ultraviolet disinfection using the discrete ordinates radiation model[J]. Water Science & Technology, 2009, 59(12): 2421-2428.

[9] BOHREROVA Z, MAMANE H, DUCOSTE J J, et al. Comparative inactivation of bacillus subtilis spores and MS-2 coliphage in a UV reactor: implications for validation[J]. Journal of Environmental Engineering - ASCE, 2006, 132(12): 1554-1561.

[10] 中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局,中国国家标准化管理委员会.GB/T19837-2005,城市给排水紫外线消毒设备[S].北京:中华人民共和国建设部,2005.

(编辑 刘 彤)