

升流厌氧污泥层反应器动力学模型

杨玉杰

(河南师范大学化学系 新乡 453002)

摘要 用碘离子作示踪剂,采用矩形脉冲示踪法测定升流厌氧污泥层(UASB)反应器的流动分布。建立了串级返混加沟流模型。模型简单,能够反映反应器流动分布,具有较强的拟合能力和良好的适用性。运用流动模型和 Monod 方程,建立了 UASB 反应器稳态模型,并对模型参数进行了估计。通过灵敏度分析,进水基质浓度 S_0 ,废水流量 Q ,最大比基质降解速率 μ_{\max} 对出水基质浓度有较大影响。在稳态模型的基础上又建立了 UASB 反应器动态模型,利用此模型,对出水基质浓度序列 S_t 和产气量序列 Q_g 进行计算预测,平均偏差分别 5.40% 和 7.46%,标准偏差分别为 7.02% 和 9.66%。

关键词 升流厌氧污泥层反应器,污泥,黑液,流动分布,动力学模型,动态模型,参数估计

70 年代,Lettinga 等开发的升流厌氧污泥层反应器(Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactor 简称 UASB 反应器),用于处理高浓度有机废水具有很高的效率^[1]。把此反应器用于石灰草浆黑液的处理,实验室容积负荷 $15\sim 30\text{kg COD/m}^3 \cdot \text{d}$,COD 去除率达 75%~85%,取得了很好的效果。UASB 反应器关键为其上部的三相分离器,该分离器首先把沼气从体系中分离出来,尔后通过沉淀室分离污泥(菌种)和废水,因此能够对沼气、污泥、废水进行有效的分离。分离特性除与反应器设计、废水性质有关外,还与操作条件有关。通常我们尽可能使反应器中的污泥浓度维持较高的数值,但这时的三相分离器可能已经超负荷运转,致使污泥回流停止,被大量冲刷出反应器,污泥负荷(单位重量污泥单位时间承担的 COD 量)变大,处理效率降低,造成恶性循环,使反应器运行破坏;又因为产甲烷细菌繁殖速度很慢,补偿污泥的损失需要很长时间。为指导反应器的设计和操作运行,本文报导对该反应器动力模型的研究结果。

1 流动模型

1.1 实验装置及测定方法

实验装置简图如图 1 所示,底部直径 12cm,高 177cm;上部直径 22cm,高 32cm;三相分离器 3.0L;总净容积 30.5L。碘离子测定采用分光光度法^[2];COD、SS 测定按文献[3];沼气流量采用 SQL-2 型湿式气体流量计测量。

1.2 UASB 反应器的特征

UASB 反应器可分为三部分:(1)反应器底部的污泥床 b (污泥浓度 $70\sim 120\text{g/L}$);(2)中部的悬浮层 f (污泥浓度 $10\sim 30\text{g/L}$);(3)上部为三相分离区 p 。

本文于 1995 年 5 月 10 日收到。

由于沼气的搅拌作用, 假设污泥床和悬浮层区为完全混合反应器, 并假设污泥床有沟流, 三相分离区沉淀室没有沼气搅拌, 可视为层流区, 用平推流反应器描述。三相分离区内污泥浓度很低, 假定在三相分离区不产生沼气和进行基质降解。

1.3 流动模型的建立

污泥床产生沼气 G_b :

$$G_b = \xi \cdot Q_2(S_0 - S_b) = \xi \cdot Q_2 \cdot \eta_b \quad (1)$$

G_b 把一部分废水提升到悬浮层(气体提升作用), 其流量 Q_{bf} 等于污泥床区产生的沼气, 其在污泥床与悬浮层交界处压力条件下的体积⁽⁴⁾

$$Q_{bf} = 1.0G_b \frac{10}{10 + h_f + h_p} = 0.886G_b \quad (2)$$

为平衡 Q_{bf} 必然有等量的废水 Q_{fb} 从悬浮层返回污泥床: $Q_{fb} = Q_{bf}$ 。另外假定污泥床存在沟流 Q_1 , $Q = Q_1 + Q_2$:

$$Q_{bf} = Q_{fb} = 0.372Q_2(S_0 - S_b) \quad (3)$$

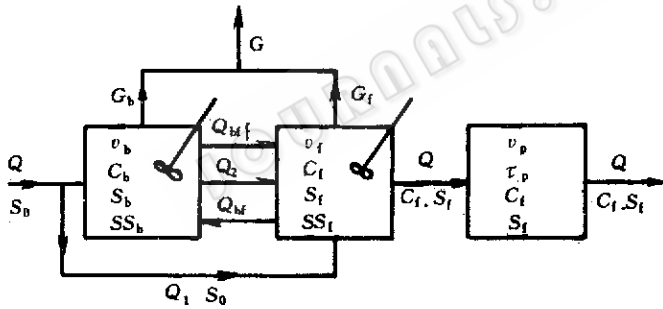


图2 反应器流动模型

Fig. 2 Flow model of UASB reactor

$$v_b \frac{dC_b}{dt} = Q_2 \cdot C_o + Q_{fb} \cdot C_f - (Q_{bf} + Q_2)C_b \quad (4)$$

$$v_f \frac{dC_f}{dt} = Q_1 \cdot C_o + (Q_{bf} + Q_2) \cdot C_b - (Q + Q_{fb}) \cdot C_f \quad (5)$$

流动分布可以通过解方程组(1~5)得出。

1.4 流动分布测定

UASB反应器流动分布的测定^(5~7)常采用P同位素或Li⁺作示踪剂、阶跃输入法测定。由于P同位素或Li⁺的测定较为麻烦, 且精确度较差, 对于大型反应器阶跃法消耗大量的示踪剂, 故采用碘离子矩形脉冲示踪法⁽⁶⁾测定UASB反应器流动分布。碘离子的测定经济、方便、精确⁽²⁾、效果很好。

1.5 参数估计

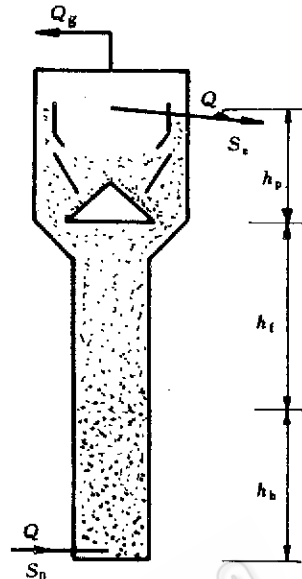


图1 UASB反应器

Fig. 1 UASB reactor

根据以上讨论, 建立其流动模型如图2所示。

UASB反应器的流动分布模型, 前人已作过报道^(5~7), 多采用扩散模型、多级串连模型、多级串连返混加沟流模型。我们倾向于采用后者, 通过参数估计确定沟流大小。分别对污泥床及悬浮层区进行示踪物质(浓度为C)平衡:

1.1.5 已知参数取值

由反应器污泥浓度按反应器高度分布曲线求得: $V_b = 8.50\text{L}$, $V_f = 18.0\text{L}$, 并已知 $S_o = 9.200\text{g/L}$, $Q = 2.50\text{L/h}$, $V_p = 3.00\text{L}$, $\zeta = 0.420\text{L/g COD}(1\text{atm}, 35.0^\circ\text{C})$, $\eta_b = 60.0\%$, $h_p + h_f = 1.29\text{m}$, 待估计参数为 Q_1 。

1.5.2 参数估计

假定旁流 Q_1 与 Q 成正比:

$$Q_1 = k_1 \cdot Q \quad (6)$$

在方程(2)(3)两端分别除以 $v_b c_o, v_f c_o$, 并令:

$$c_b/c_o = X_1, c_f/c_o = X_2, (Q_{bf} + Q_2)/V_b = \beta_1, Q_{fb}/v_b = \beta_2, Q_2/V_b = \beta_3, (Q_{bf} + Q_2)/V_f = \beta_4, \text{公式(9)(10)} (Q_{fb} + Q)/V_f = \beta_5, Q_1/V_f = \beta_6.$$

方程(2),(3)引入算子 D 表示为⁽⁹⁾:

$$(D + \beta_1)X_1 + \beta_2 X_2 = \beta_3 \quad (7)$$

$$-\beta_1 X_1 + (D + \beta_5)X_2 = \beta_6 \quad (8)$$

$$[D^2 + (\beta_1 + \beta_5)D + (\beta_1\beta_5 - \beta_2\beta_1)]X_1 = \beta_3\beta_5 + \beta_2\beta_6 \quad (9)$$

$$[D^2 + (\beta_1 + \beta_5)D + (\beta_1\beta_5 - \beta_2\beta_1)]X_2 = \beta_1\beta_6 + \beta_3\beta_1 \quad (10)$$

方程(8),(9)的特征根为:

$$r_{1,2} = \{-(\beta_1 + \beta_5) \pm [(\beta_1 - \beta_5)^2 + 4\beta_2\beta_1]^{1/2}\}/2 \quad (11)$$

已知初始条件: $t = \tau_p, X_1 = 0, X_2 = 0$

$$t \rightarrow \infty, X_1 = 1, X_2 = 1, r_{1,2} < 0$$

得到:

$$X_2 = 1 - \frac{\beta_1 - \beta_5 - r_2}{r_1 - r_2} \exp[r_1 \cdot (t - \tau_p)] + \frac{\beta_1 - \beta_5 - r_1}{r_1 - r_2} \exp[r_2 \cdot (t - \tau_p)] \quad (12)$$

利用单纯形法⁽¹⁰⁾求出 Q_1 最小二乘估计, $Q_1 = 0.0778\text{L/h}$, 因此, $k_1 = 0.0311$ 。用估计出的 Q_1 值, 采用(12)式计算 UASB 反应器流动分布 c_f/c_o , 并和实验值 c_e/c_o 比较(见表1), 计算值和实验值误差较小。

表 1 UASB 流型分布

Table 1 Fluid flow tracer distribution of UASB reactor

t/h	Exp.	Calc.	t/h	Exp.	Calc.
1	0.008	0.002	11	0.605	0.585
2	0.033	0.029	12	0.639	0.623
3	0.084	0.100	13	0.672	0.658
4	0.167	0.178	14	0.702	0.690
5	0.254	0.253	15	0.730	0.719
6	0.332	0.322	16	0.758	0.746
7	0.403	0.382	17	0.784	0.769
8	0.463	0.443	18	0.809	0.791
9	0.518	0.495	19	0.832	0.810
10	0.565	0.542	20	0.854	0.828

表 2 模型计算值 S_f 和实验值 S_e 比较

Table 2 The substrate concentration of experimental and model

$Q/\text{L} \cdot \text{h}^{-1}$	$S_e/\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$	$S_f/\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$
1.00	1.050	1.077
2.00	1.477	1.421
3.00	1.852	1.939
4.00	2.596	2.551
5.00	3.152	3.161
6.00	4.396	3.705

$S_o = 8.000\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$

2 模态模型及参数估计

2.1 模型建立

假定 UASB 反应器中基质降解符合 Monod 方程^[11]:

$$\mu = \mu_{\max} \frac{S - S_n}{K_s + S - S_n} \quad (13)$$

$$S_n = k_n S_o \quad (14)$$

对污泥床及悬浮层进行稳态基质平衡及流量平衡:

$$Q_2 S_o + Q_{fb} S_f - (Q_2 + Q_{bf}) S_b - V_b \cdot SS_b \mu_{\max} \frac{S_b - S_n}{K_s + S_b - S_n} = 0 \quad (15)$$

$$Q_1 S_o + (Q_2 + Q_{bf}) S_b - (Q_2 + Q_{fb}) S_f - V_f \cdot SS_f \mu_{\max} \frac{S_f - S_n}{K_s + S_f - S_n} = 0 \quad (16)$$

$$Q_{fb} = Q_{bf} = 0.372 Q_2 (S_o - S_b) \quad (17)$$

$$Q_1 = 0.0311 Q \quad (18)$$

$$Q_2 = Q - Q_1 \quad (19)$$

当污水进水浓度、流量改变时,污泥床和悬浮层体积和污泥浓度会有较大变化。由于三相分离器对污泥分离效率高,污泥流失少,产甲烷细胞繁殖速度很低,在短期内产生的污泥量也很少,可以认为,反应器内污泥总量保持不变。为简化计算,假定污泥床和悬浮层污泥量也不变。

在 $Q = 2.50 \text{ L/h}$, $S_o = 9.200 \text{ g/L}$ 的条件下测得:

$$V_b \cdot SS_b = 8.5 \times 74.8 = 635.8 \text{ g} \quad (20)$$

$$V_f \cdot SS_f = 19.0 \times 23.6 = 448.4 \text{ g} \quad (21)$$

至此,反应器动力学模型已经建立。

2.2 参数估计

联立方程(13)~(21),采用最大梯度法解此方程组^[12],并根据 $Q = 1, 2, 3, 4, 5 \text{ L/h}$ 的实验结果(初始值选取: $S_f = S_e$, $S_b = S_e + 1$; 另外 $Q = 6.00 \text{ L/h}$ 时,误差较大,舍去此点)并以:

$$OBJ = \sum_1^5 (S_f - S_e)^2 \quad (22)$$

作为目标函数,采用单纯形加速法^[10]对 μ_{\max} 、 K_s 、 k_n 进行寻优,得到:

$$\mu_{\max} = 0.03442 \text{ h}^{-1}, \quad k_s = 1.343 \text{ g/L}, \quad k_n = 0.1176$$

采用 μ_{\max} 、 k_s 、 k_n 估计数据,对 S_f 进行计算,表 2 可以看出,计算值和实验值误差较小。

2.3 灵敏度分析

为找出对 S_f 影响最大的因素,把 S_o 、 Q 、 μ_{\max} 、 K_s 、 k_n 、 k_1 等参数分别增加 2.0% (S_o 、 Q 、 μ_{\max} 、 K_s 、 k_n 、 k_1 等参数取估计数值)计算 S_f 的改变率分别如表 3。从表 3 可见 S_o 、 Q 、 μ_{\max} 对 S_f 影响较大。

表 3 灵敏度分析

Table 3 Sensitivity analysis

Parameters (increasing 2%)	S_o	Q	μ_{\max}	K_s	k_n	k_1
Variation of S_f /%	2.99	1.80	-1.75	0.93	0.72	0.00

3 动态模型

3.1 动态模型模型建立

3.1.1 实验条件: 在进水流量 $Q = 3.00\text{L/h}$ 的条件下, 每小时后改变一次 S_0 , 形成一个输入序列 $S_0^{(i)}, i = 1, \dots, 130$ ($S_0^{(i)}$ 序列最大值为 17.250g/L , 最小值为 3.450g/L , 见图 3)。同时, 测定出水基质浓度 S_e 和产气量 Q_g , 得到两个序列 $S_e^{(i)}, Q_g^{(i)}, i = 1, \dots, 130$ 。

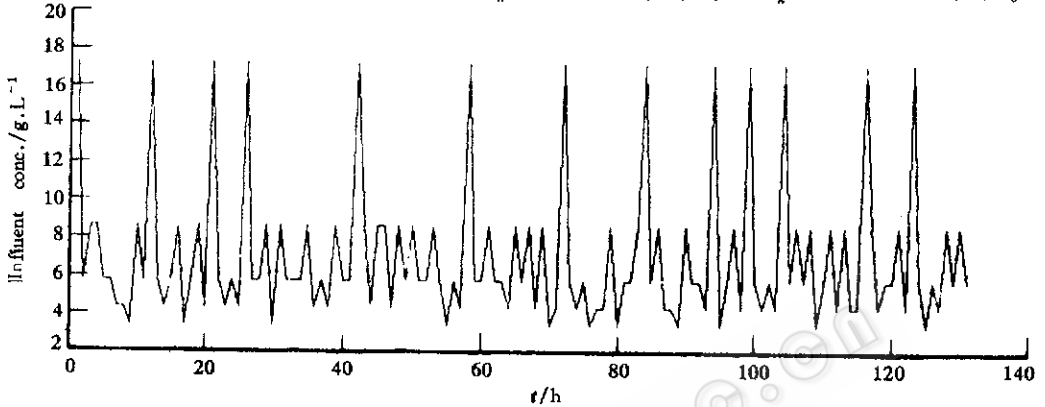


图 3 进水 S_0 序列
Fig. 3 Influent series S_0

3.1.2 模型建立: 根据已建立的 UASB 反应器稳态模型, 分别对污泥床及悬浮层进行基质、产气量和流量平衡 (由于反应器在动态情况下运行, 采用基质去除速率乘以产气系数 ζ 计算产气量 G):

$$v_b \frac{dS_b}{dt} = Q_2 S_0 + Q_{fb} S_f - (Q_2 + Q_{bf}) S_b - v_b \cdot S \cdot S_b \cdot \mu_{\max} \frac{S_f - S_{nb}}{K_S + S_b - S_{nb}} \quad (23)$$

$$v_f \frac{dS_f}{dt} = Q_1 \cdot S_0 + (Q_2 + Q_{bf}) S_b - (Q + Q_{fb}) S_f - v_f \cdot S \cdot S_f \cdot \mu_{\max} \frac{S_b - S_{nf}}{K_S + S_f - S_{nf}} \quad (24)$$

$$v_b \frac{dS_{nb}}{dt} = Q_2 \cdot S_0 k_n + Q_{fb} S_{nf} - (Q_2 + Q_{bf}) S_{nb} \quad (25)$$

$$v_f \frac{dS_{nf}}{dt} = Q_1 \cdot S_0 k_n + (Q_2 + Q_{bf}) S_{nb} - (Q + Q_{fb}) S_{nf} \quad (26)$$

$$G = G_b + G_f \quad (27), \quad Q_1 = 0.0311Q \quad (28)$$

$$Q_2 = Q - Q_1 \quad (29), \quad G_b = \zeta v_b \cdot S S_b \cdot \mu_{\max} \frac{S_b - S_{nb}}{K_S + S_b - S_{nb}} \quad (30)$$

$$G_f = \zeta v_f \cdot S S_f \cdot \mu_{\max} \frac{S_f - S_{nf}}{K_S + S_f - S_{nf}} \quad (31), \quad Q_{fb} = Q_{bf} = \frac{10}{10 + h_f + h_p} G_b \cdot \psi \quad (32)$$

ψ 表示单位体积沼气能够提升的液体量, 文献[4]中 ψ 值为 1.0。

3.1.3 方程求解: 用稳态条件下估计的参数:

$$\mu_{\max} = 0.03442\text{h}^{-1}, \quad K_S = 1.343\text{g/L}, \quad k_n = 0.1176, \quad \zeta = 0.42\text{L/gCOD}, \quad \psi = 1.0$$

以及初始条件: $t = 0$ 时, $S_b = 2.458$, $S_f = 1.938$, $S_{nb} = 0.9408$, $S_{nf} = 0.9408$, $G = 0$ 。

取计算步长为 0.1h , 采用哈明法^[13] 解方程组(23)~(26), 得出其解 S_f 和 G 。由于 $\tau_p = 1.0\text{h}$, 把 S_f 序列平移 1h , 即可求得出水浓度序列:

$S_f^{(i)}, i = 2, \dots, 131; G^{(i)}, i = 1, \dots, 130$ 。 S_e 序列平均偏差 6.17% , 标准偏差 8.14% ; Q_g

序列平均偏差 17.3%, 标准偏差 18.8%。

3.2 参数估计

3.2.1 μ_{\max} 、 K_s 、 k_n 、 ζ 、 ψ 参数估计: 采用单纯形加速法^[10]对 μ_{\max} 、 K_s 、 k_n 、 ζ 、 ψ 进行动态估计。为了统一估计参数的数量级, 利用稳态估计值:

$$\mu_{\max} = 0.03442\text{h}^{-1}, K_s = 1.343\text{g/L}, k_n = 0.1176, \zeta = 0.42\text{g/gCOD}, \psi = 1.0.$$

并令被估计参数为:

$$X_1 = \mu_{\max}/0.03442 \quad (33), \quad X_2 = K_s/1.343 \quad (34)$$

$$X_3 = k_n/0.1176 \quad (35), \quad X_4 = \zeta/0.42 \quad (36)$$

$$X_5 = \psi/1.0 \quad (37)$$

3.2.2 目标函数的确定: 输出序列有两个: $S_e^{(j+1)}$ 和 $Q_x^{(j)}$, 为消除初值选择的影响, 选择目标函数为:

$$OBJ = \sum_{j=1}^{150} \{W_1(S_e^{(j)} - S_e^{(j+1)})^2 + W_2(Q_x^{(j)} - G^{(j)})^2\} \quad (38)$$

W_1, W_2 为加权系数。分别令: (1) $W_1 = 1, W_2 = 0$; (2) $W_1 = 0, W_2 = 1$; (3) $W_1 = 1/S_e^2, W_2 = 1/Q_x^2$ 。估计和预测结果如表 4

表 4 估计和预测结果

Table 4 Results of parameter estimation and forecasts

Parameter and results	$W_1=0, W_2=0$	$W_1=1, W_2=1$	$W_1=1/S_e^2, W_2=1/Q_x^2$
μ_{\max}/h^{-1}	0.04458	0.03123	0.04470
$K_s/\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$	2.404	1.227	2.836
k_n	0.09769	0.1064	0.08788
$\zeta/\text{L} \cdot \text{g}^{-1}$	0.4311	0.5055	0.5178
ψ	0.3568	1.0246	0.2561
S_e SD/%	5.41	6.16	5.40
SD/%	7.08	8.24	7.02
Q_x SD/%	7.41	7.40	7.46
SD/%	9.73	10.2	9.66

从表 4 可知, 目标函数采用 S_e 和 Q_x 误差平方和结果较好, 计算结果见图 4, 5。

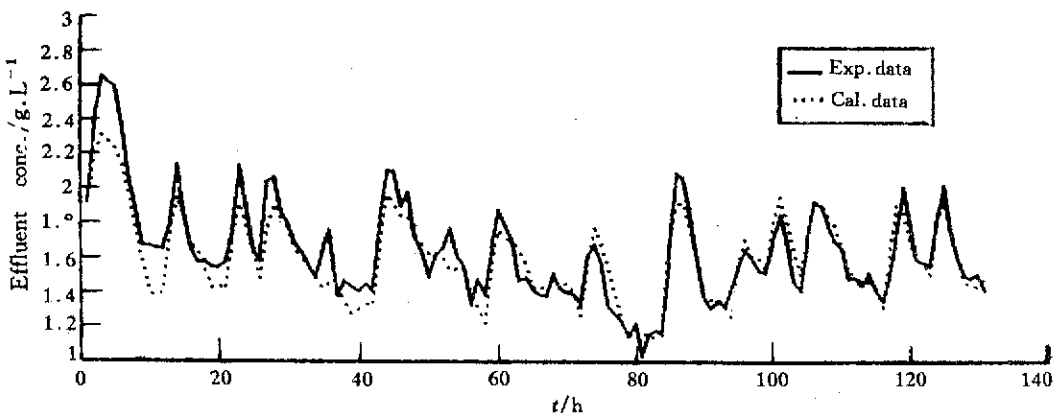


图 4 出水序列

Fig. 4 Effluent series

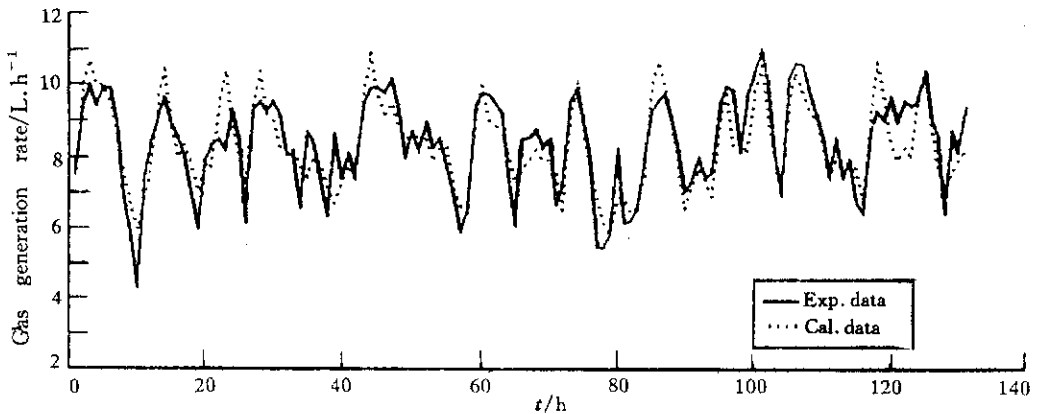


图 5 产气量序列

Fig. 5 Biogas series

3.3 结 论

用矩形脉冲示踪法测定 UASB 反应器流动分布方便可行,既能保证精度,又能节约大量示踪剂;碘离子的测定简单、精确,且碘离子对厌氧菌无毒害作用,可以使用;采用串连返混加旁流模型描述 UASB 反应器可行。由于反应器高径比很大,旁流不太明显,这跟 Q_1 值较小是相符的;稳态模型能很好描述 UASB 反应器动力学特性,误差较小;由于实验数据较少,没有考虑 S_0 的影响,估计的参数代表性不强,但作为动态条件下的参数初值是具有一定意义的;动态模型简单,能反映 UASB 反应器的实际运行情况。

符 号 说 明

Q —废水流量/ $L \cdot h^{-1}$	SS —污泥浓度/ $g \cdot L^{-1}$	ζ —产气系数/ $L \cdot g^{-1}$
c —示踪剂浓度	K_s —饱和常数/ $g \cdot L^{-1}$	t —时间/h
h —高度/m	ψ —提升系数	Q_2 —通过污泥床流量/ $L \cdot h^{-1}$
G —沼气量/ $L \cdot h^{-1}$	S —废水基质浓度(以 COD 计)	D —微分算子
τ —停留时间/h	η —基质去除率/%	μ —比基质降解速率/ h^{-1}
Q_1 —旁流流量/ $L \cdot h^{-1}$	V —体积/L	

下 角 标

b —污泥床	\max —最大	bf —污泥床到悬浮层
p —三相分离区	f —悬浮层	e —出水(实测)
fb —悬浮层到污泥床	o —进水	n —不可降解
g —沼气		

参 考 文 献

- [1] Lettinga G. *Biotechnol Bioeng.* 1980, **22**: 699~734.
- [2] 日本规格协会著,吴锦译,工业废水分析方法.北京:环境科学出版社,1987,196~200.
- [3] 国家环保局.水和废水监测分析方法.北京:环境科学出版社,1989,第三版.
- [4] Vander M. *Biotechnol Bioeng.* 1983, **25**: 2531~2556.
- [5] 隋军.厌氧处理机理及设备的研究,哈尔滨建筑工程学院硕士论文,1984.
- [6] Vander M. *Biotechnol Bioeng.* 1982, **24**: 443~452.
- [7] Vander M. *Biotechnol Bioeng.* 1978, **20**: 1577~1549.

- [8] 周春晖. 化工过程控制工程, 北京: 高等教育出版社, 1980. pp. 57~433.
- [9] Ray Wylie C. 西安交通大学译. 高等工程数学, 北京: 人民教育出版社, 1980, 110~126.
- [10] 范鸣玉, 张莹. 最优化技术基础, 北京: 清华大学出版社, 1982. 156~171.
- [11] 秦麟源著. 废水生物处理, 上海: 同济大学出版社, 1989. 55~57.
- [12] 车克健, 黄佩琼. FORTRAN 科学计算与管理程序汇编, 北京: 中国铁道出版社, 1987. pp. 66~69.
- [13] 徐士良. FORTRAN 常用算法程序集, 北京: 清华大学出版社, 1992. 229~232.

Dynamic Model of UASB Reactor

Yang Yujie

(Chemical Department of Henan Normal University, Xinziang 453002)

Abstract By means of rectangular pulse response experiment with a iodine tracer, a description of the fluid flow distribution in UASB reactor used for treatment of lime straw black liquor was derived. It appeared that the sludge bed and sludge blanket could be described as perfectly mixed regions, which were interconnected by main stream, back-mixing stream and by-pass stream. the fluid flow in the region of three-phase separation could be described as plug flow. The model is simple, suitable for describing the fluid flow pattern in the reactor, and had good flexibility and fitability. Using the fluid flow model and monod equation of reaction kinetics, kinetic model of UASB reactor was established and the parameters were estimated. By means of sensitivity analysis, it was found that the flow rate Q , the initial substrate concentration S_0 and μ_{\max} had big influence on the effluent substrate concentration S_f . Based on kinetic model, dynamic model of UASB reactor was established and the parameters were estimated. Under the condition of flow rate $Q=3.00\text{L/h}$, series of effluent substrate concentration S_f and flow rate of biogas Q_g corresponding to influent substrate concentration S_0 were calculated. The mean error of series S_f was 5.40% and standard deviation of S_f was 7.02%. The mean error and standard deviation of series Q_g were 7.46% and 9.66% respectively.

Key words UASB reactor, sludge, black liquor, fluid flow distribution kinetic model, dynamic model, sensitivity analysis, parameter estimation