

絮凝过程 CFD 数值模拟研究

宋峻林¹, 唐荣联², 王洪^{1*}

(1. 重庆理工大学化学化工学院, 重庆 400054; 2. 中机中联工程有限公司, 重庆 400039)

摘要:将絮凝过程与计算流体力学结合起来, 综述了絮凝过程中计算流体力学的应用研究, 用计算流体力学对絮凝过程中絮凝池流场进行模拟分析, 得到絮凝过程速度云图、压力云图、浓度梯度图, 直观反映了絮凝过程。这种参数化建模方式简化了研究过程, 可对絮凝工艺研究与设备优化提供参考依据。

关键词:絮凝; 计算流体力学; 流场模拟; 参数化

中图分类号: X703

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2018)08-0231-05

DOI: 10.16606/j.cnki.issn.0253-4320.2018.08.051

A review on CFD numerical simulation of flocculation process

SONG Jun-lin¹, TANG Rong-lian², WANG Hong^{1*}

(1. College of Chemistry and Chemical Engineering, Chongqing University of Technology, Chongqing 400054, China;
2. China CMCU Engineering Corporation, Chongqing 400039, China)

Abstract: This paper reviews the application of computational fluid dynamics (CFD) in the flocculation process. CFD is used to simulate and analyze the flow field and velocity field in flocculation tank during flocculation process. The speed cloud chart, pressure cloud chart and concentration gradient map of flocculation process are obtained, which reflects directly the flocculation process. This parameterization modeling method can simplify research process and provide references for the process research and equipment optimization of the flocculation process.

Key words: flocculation; computational fluid dynamics (CFD); flow field simulation; parameterization

在全球范围内水污染愈加严重的背景下, 生活污水和工业废水的大量产生和排放造成水环境不断恶化, 且污染趋势越来越严重, 导致水资源的紧缺。其中, 工业废水排放量大, 成分复杂, 对环境污染严重。生活污水污染程度较低, 但排放量较大, 如处理不当或直接排放, 容易引起水体富营养化, 造成水体污染, 对饮用水源构成威胁^[1]。污水处理是十分必要的, 絮凝技术作为一种较为有效且成本较低的预处理方法是环保领域的一项重点研究项目^[2]。运用计算机模拟研究絮凝过程是一种大趋势, 本文中从计算流体力学(CFD)在絮凝反应、絮凝设备结构优化等方面应用进行介绍。

1 絮凝研究背景

在污水处理的众多方法中, 絮凝作为一种基础处理手段被广泛应用。絮凝过程是运用物理化学方法来对污水进行处理。向污水中加入絮凝剂, 使污水中的悬浮微粒在絮凝剂的作用下形成矾花, 形成的矾花在溶液中不断运动碰撞形成大颗粒絮体沉降

于容器底部, 达到净化水体的目的。絮凝过程目前普遍运用于污水处理工艺中, 在整个废水处理工艺过程中占据重要地位。絮凝过程分为 3 个主要阶段: ①混合, 絮凝剂水解后产物在流体中迅速扩散, 与流体中微小颗粒充分结合, 同时使胶体颗粒脱稳, 促进矾花形成; ②絮凝反应, 形成的矾花相互碰撞黏结长大形成可分离的较大颗粒; ③沉淀, 生成的较大颗粒物从流体中沉淀分离。在絮凝作用机理的研究中, 吸附架桥学说是目前人们普遍接受的一种理论。该理论认为絮凝过程是压缩双电层、吸附电中和、架桥吸附和卷扫、网捕等物理化学过程共同作用的结果^[3]。

絮凝动力学就是研究絮凝过程中颗粒状态变化, 研究絮凝水力条件时常常以颗粒粒径和颗粒数为主要研究对象。絮凝过程中水里小的不稳定微粒集聚变大, 或形成絮团, 从而加快粒子的聚沉, 从而达到固-液分离目的。絮凝过程中, 絮体成长经历聚集长大、破碎和成长破碎达到平衡 3 个阶段^[4]。表 1 为絮体成长过程中不同时期的形

收稿日期: 2018-01-30; 修回日期: 2018-06-06

作者简介: 宋峻林(1994-), 男, 硕士生; 王洪(1966-), 男, 博士, 教授, 研究方向为过程装备, 通讯联系人, wanghong@cqu.edu.cn。

态和结构特征。

表 1 絮体成长三阶段特征

絮凝过程	絮凝状态	絮体形态、结构特征
初期	成长阶段	胶体颗粒不断碰撞聚集成絮体,粒径迅速增大
中期	较易发生破碎	絮体结构多为大而疏松多孔
后期	成长和破碎达到平衡	颗粒粒径分布趋于稳定

絮体破碎一般分为破损与破裂^[5]:①絮体破损,指在较小水流剪切力作用下絮体表面微小颗粒脱落,导致絮体粒径减小、水中小颗粒增加,这种现象也称“表面腐蚀”;②絮体破裂,较大的剪切力使大絮体断裂成多个大小相近的小絮体,但在此过程中水里原始颗粒浓度并未增加,该现象也称“大尺度破裂”。

目前人们普遍认可把絮凝动力学的研究分为速度梯度理论和微涡旋理论 2 种。速度梯度理论认为絮凝推动力分为异向絮凝、同向絮凝和差降絮凝 3 种形式。异向絮凝是指由于微粒布朗运动导致絮体颗粒的无序运动而产生碰撞并不断聚集成为较大颗粒,碰撞速率是颗粒絮凝速率的重要影响因素,由布朗运动原理得知颗粒碰撞速率仅与颗粒物浓度和水温有关,与其他因素无关;同向絮凝理论则认为,在有外在机械搅拌或水力等外力推动下,颗粒间相互碰撞并聚集成长;差速沉降则是由于颗粒粒径沉速差引起的一种絮凝方式,在某种程度上也可以看作是一种特殊的同向絮凝。由于速度梯度理论的 3 个形式都是在层流条件假设下发展出来的,与实际流动情况有较大差距,故而衍生发展出紊流环境微涡旋理论,颗粒随机的不规则的运动称之为颗粒紊流运动,颗粒接触碰撞的主要推动力是涡旋形成的剪切力和惯性离心力,剪切力在某种程度上会破坏生成的絮凝体,惯性离心力则使小颗粒在絮凝过程中粒径趋于均匀。然而随着絮凝体粒径增大,涡旋所产生剪切力也会增加,因此在絮凝池设计建造时,控制涡旋剪切力,是确保良好絮凝效果的关键因素。

2 CFD 在絮凝反应中的应用

计算流体力学 (computational fluid dynamics, CFD) 是在传统实验研究和理论研究之后的用于研究流体流动问题以及传热问题的一种方法^[6]。计算流体力学的基本特征是数值模拟和计算机实验。计算流体力学在研究过程中能够充分考虑到各个反

应进行的全过程以及多维和多相体系的存在。计算流体力学的应用可以很大程度上将许多实验室和实物研究较困难项目变得更加简单易操作,此外,计算流体力学方法还可以将许多传统研究中无法观察到的实验现象和过程直观地呈现给研究者,大大缩短科研时间,降低科研成本,提升科研成果。

传统废水处理研究,通常采用烧杯实验进行混凝沉淀工艺研究。烧杯试验虽然简单易操作,可以直观地反映理想条件下流体混凝、沉淀过程,为实际工业生产提供一定理论数据依据,但烧杯试验局限性较大,实验运行中水力环境、实验参数等诸多因素仅仅停留在理想层面,与实际生产差距较大,并不能真实地反映工艺过程。随着计算机科学的发展,仿真模拟软件不断开发运用,计算流体力学 (CFD) 逐渐受到研究者们关注,运用 CFD 技术来描述絮凝工艺过程,突破了传统烧杯试验的局限性,更加直观、真实地反映絮凝工艺过程。运用数值计算和计算机求解流体力学相关方程,具有精度高、耗时短、费用低,无需实验测量,可提供整个流场内相关数据等优点^[7]。

国外应用 CFD 对絮凝反应池进行仿真模拟研究较早。Harvey 等在 1982 年就首次将 CFD 技术用于模拟搅拌釜的二维流场,突破了传统实验研究方式,打开了将 CFD 运用于仿真模拟的大门,为絮凝工艺过程的研究提供了新思路。随后 Aubin 等^[8]分析了仿真模型和计算策略选取对搅拌反应器流场模拟结果的影响,对计算流体力学运用提供了思路,说明计算流体力学在流场模拟中的显著优势。Lee 等^[9]将多维离散化种群平衡方程与计算流体力学模拟相结合建立模型,模拟沉积盆地湍流絮凝沉降过程。以生成稳态流场数据,并依次模拟絮凝和沉降过程。在二维简化池系统建模和仿真研究中较好地模拟了质量平衡和絮体尺寸演变过程,并直观地展现出颗粒/絮体尺寸和固体浓度分布。因此,多维离散化种群平衡方程与计算流体力学模型可用作天然和工程絮凝沉降系统以及絮凝剂辅助沉积池的有效模拟工具。随着水处理工程广泛应用,国内对絮凝反应池的研究也越来越重视,并且取得了一定成绩,杨志浪等^[10]运用 Fluent 对隔板絮凝池进行数值模拟,研究发现,数值模拟絮凝池内水流变化状态与实际情况相吻合,映证了计算流体力学的可靠性与准确性。CFD 模拟将一些实践中难以进行和操作的实验过程简化模拟,得出具有实际工程意义的结果。

3 絮凝反应的 CFD 模拟

3.1 絮凝过程内部流场的模拟

计算流体力学广泛运用于设备和机械运行时流场分析和实际工况验证,得到设备运行的可行性与设备最佳工作条件参数。对反应设备内部流场进行模拟,将微观粒子运动轨迹模拟出来,将流场的压力分布、速度分布以及湍动能分布直观地展示出来,对于分析絮凝过程具有重大意义。图 1 为 Yang 等^[11]对絮凝反应器内流场的研究模拟。

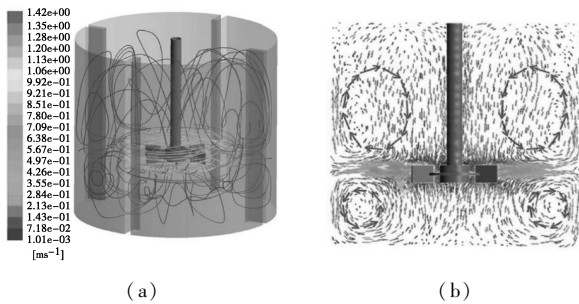


图 1 搅拌絮凝反应釜内流场模拟

借助 CFD 模拟工具,国内外运用计算流体力学(CFD)对各种反应场进行模拟分析,很大程度上将微观反应场形态(如速度梯度、压力梯度、浓度梯度

表 2 几种絮凝过程流场模拟研究对比

研究者	流场模拟形式	结果与结论
Bridgeman	絮凝流动流场模拟	研究絮凝反应器的絮凝性能,评估了絮凝过程中絮体产生的强度,达到提高有机质去除率目的
Sun	三维沉降过程流场模拟	根据范德华力和流体颗粒相互作用力的影响,研究了床层结构密度和颗粒末端速度与现有工艺的吻合度;淤泥在沉降过程中的内聚行为归因于淤泥颗粒本身之间内聚力和颗粒多分散性;在颗粒微观力学基础上,通过数值模拟得到碰撞频率函数
Ruan	尾矿浓密机过程流场模拟	得到深锥浓密机密度和湍动能分布规律,分析尾矿絮体粒度分布的时空变化和深锥浓密机主要絮凝位置,发现了全尾矿的絮凝沉降规律
Wang	絮凝膜过滤一体化过程流场模拟	引入微量基于实时图像进行絮凝动力学分析,在絮凝面积与膜过滤面积之间存在隔板的罐内发生部分絮凝,可实现一体化工艺的最佳运行性能;絮体尺寸与微尺度涡旋相似;尺寸较大,有利于通过相对运动和碰撞形成松散的沉积层,从而减轻膜污染

等)直观地反映出来。对于研究反应过程机理、动力学等提供了良好依据,可以更好地解决絮凝过程中存在的各类问题。表 2 为国内外一些研究者^[12-15]絮凝过程流场模拟近期部分研究工作汇总。

3.2 参数化模拟絮凝设备

由于计算流体力学参数化建模形式,对于反应设备,可以更加简便地进行参数化试验。这种简便的参数化建模模拟还经常运用于工况实时分析。以参数化方式的实时分析,可以更加直观、更全面反映实际情况,可以从纵向到横向全方面对比,得到同等条件下最佳操作条件。Zhou 等^[16]为了获得分离式浓浆中红泥流动模式和沉降行为,采用计算流体力学(CFD)模拟量产稠化器中三维流场。模拟结果与现场测量结果吻合良好,增稠剂流动模式在速度场和浓度场上均得到一定程度证实。并对进料口和自稀释系统进行了优化试验。图 2 是周天对分离式浓浆参数化建模,这样参数化建模方式可以很简便地模拟相同环境不同设备参数对絮凝过程的影响。

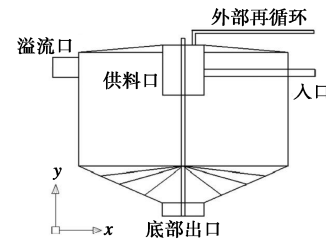


图 2 参数化建模分离式浓浆机

图 3 表明周天的模拟实验中,图中 1~8 为不同进口和出口尺寸比例的浓浆机模拟曲线,1~8 进口尺寸逐渐减小,出口比例逐渐增大,最佳增稠系统可将进料口固体浓度从 110 g/L 稀释到 86 g/L,有利于团聚物形成和提高赤泥沉淀速度。此外,使用循环泵可将絮凝剂用量从 105 g/t 降低到 85 g/t。

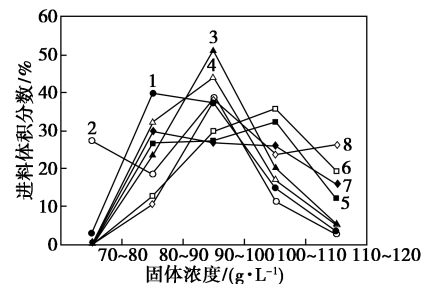


图 3 参数化模拟结果对比

Mohammadighavam 等^[17]运用计算流体力学(CFD)对泥炭开采污水絮凝器工作状态进行全尺寸

三维参数化模拟,寻找最佳混合条件[速度梯度(G -值)]。CFD 模型首先进行了几种屏障设置,然后测试最佳结构,包括不同障碍物之间的距离、开口宽度(B)和絮凝器宽度(W)之间的距离优化。模拟结果显示, B/W 比率为 $1/4$ 时 G 值最优。国内方面,吴成娟^[18]运用 CFD 对平流沉淀池进行数值模拟,分析了流体进口高度、颗粒物密度、挡板和扰流板位置对沉淀池浓度场和流场的影响,提出平流沉淀池优化工艺参数。邹琳^[19]对烧杯试验进行数值模拟,对不同的搅拌桨几何尺寸、入水深度、转速以及容器形状做出数值模拟,反映这些参数对流体环境的影响,为更加准确地进行烧杯试验提供良好条件。计算流体力学(CFD)参数化研究过程更好地将复杂工艺条件和设备结构参数进行简化。在模拟过程中设备参数可以做到与实际 $1:1$ 的比例进行仿真模拟,优化工艺参数和设备结构参数具有更高的可靠性和实际性。

3.3 絮凝设备模拟结构优化

计算流体力学常用于现有设备结构的优化分析,参数化的建模,易于研究设备结构的改变时不同结构设计对工况的影响,以满足特定工艺需求和得到更优的工作状态。对于不同结构设计在相同的运行参数下的模拟分析,可得出不同结构设计的优缺点,更好地对设备进行设计。Ren 等^[20]通过计算流体力学(CFD)和实验方法,研究叶轮类型对聚苯乙烯颗粒与硫酸铝絮凝过程中絮体尺寸变化的影响。

图 4~图 6 中 Ren 对 3 种搅拌桨进行建模仿真模拟,得出在相同环境参数下多种桨型的速度云图(图 5)、湍动能图(图 6),再结合 CFD 软件后处理,结果显示,在给定空间平均速度梯度 G 下,叶轮类型对水动力环境和絮体生长过程有很大影响。对比 3 种不同尺寸叶轮,R100 叶轮作为径向叶轮,可以产生很大的流体剪切力,从而有效地改善絮体结构,最终形成大絮状物。相反,A200 和 A310 叶轮作为轴向叶轮,可以产生很好的轴向流动循环,在絮凝早期阶段有效地加速絮凝体生长,而不会导致絮体结构破碎。因此,这 2 种类型叶轮应互为补充,以提高最终絮凝物质量。

计算流体力学(CFD)为分析流体状态提供一种新思路和方法,能够较准确地模拟并预测不同工况下絮凝池内流体流动场情况,同时可以直观地反映出絮凝过程中流场状态,完全能够满足一般工程实际需要。CFD 模拟表明速度矢量、湍动能、有效能

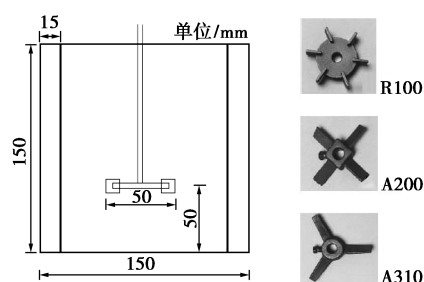


图 4 3 种搅拌桨建模

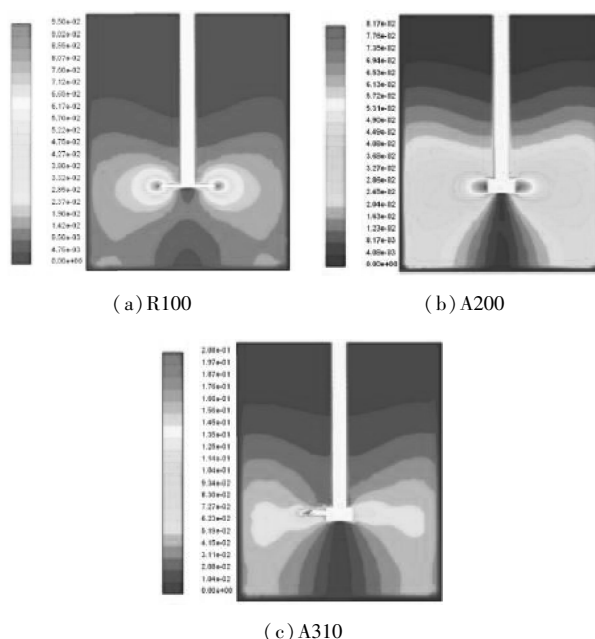


图 5 3 种搅拌桨仿真速度云图

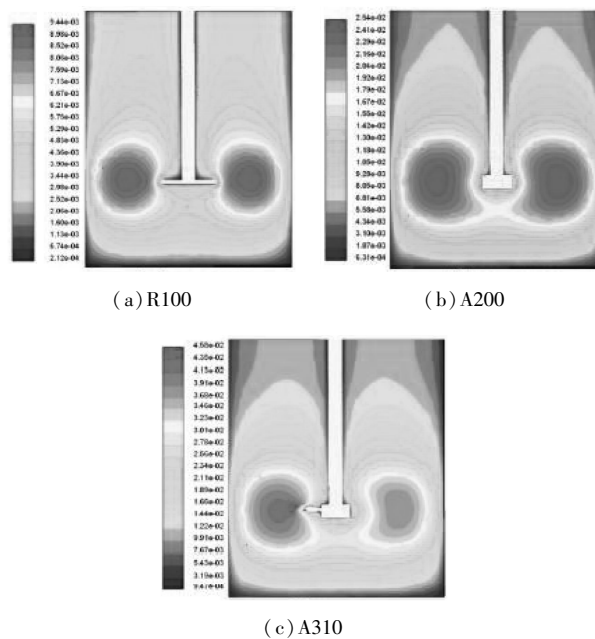


图 6 3 种搅拌桨湍动能图

耗等对絮体性状、尺度及絮凝效果有显著影响,利用

这些仿真结果可以对现有絮凝反应及其设备进行设计和优化,改变絮凝强度和分布,有效改善絮凝效果。

4 结论与展望

计算流体力学(CFD)是将数值模拟和计算机实验结合,用于研究流体流动以及传热的一种方法。计算流体力学在研究絮凝过程中能够充分探讨多维和多相体系下絮凝反应全过程。运用这种方法很大程度上简化了絮凝反应的实验室实验研究和设备设计优化。此外,计算流体力学研究絮凝反应将絮凝池内复杂的湍流情况和粒子运动过程直观地呈现给研究者,大大缩短研究时间,降低研究成本,为絮凝机理以及动力学研究提供理论支撑,更为絮凝工况设备优化发展提供实验依据。

计算流体力学(CFD)在数值模拟方面的优势有:①与传统方法相比,数值模拟操作简单、耗时少,可以大量节省人力物力财力。②数值模拟方法具有可重复性,而且模拟条件控制方便,可以多次模拟,进行优化。③通过后处理软件(如 tecplot)可以对模拟结果进行直观显示,易于观察、分析。当然 CFD 数值模拟在一定程度上也存在一些局限性,主要体现在:①数值模拟方法首先要求有一个准确度高的数学模型,该模型的建立和简化有一定难度,一旦模型选择错误将会严重影响模拟结果。②数值模拟过程中需要对控制方程进行离散化处理,会遇到稳定性、收敛性等问题。③数值模拟效率会受到计算机运行速度和容量的影响,有时候无法采用复杂模型,必须进行必要简化。④数值模拟本身就是一种近似模拟过程,因此结果存在一定的不准确性,需要尽可能控制误差在可接受范围内。

本文中仅对絮凝过程的计算流体力学(CFD)模拟过程研究应用与成果进行综述,目前仍有一些其他数值模拟方式(如 PIV 粒子图像速度场仪等)在絮凝过程中也有较好应用,也可通过类似这些模拟技术对絮凝过程进行进一步研究。

参考文献

- [1] 姚吉伦,张星,周振,等.陶瓷膜技术在水处理中的研究进展[J].重庆理工大学学报,2016,30(12):69-74.
- [2] 刘兴,万树兴,吴春笃,等.磁絮凝处理废水工艺条件的响应曲面法优化研究[J].化工环保,2010,30(4):21-24.
- [3] 吴巍,范志伟,徐立群,等.絮凝反应池中流体的 CFD 模拟及应用性能[J].化工进展,2012,31(2):283-286.
- [4] 张昕,郑广宏,乔俊莲,等.微生物絮凝剂的絮凝机理初探[J].环境科技,2007,20(2):104-107.
- [5] 展丹.变速度双层斜板混凝沉淀单元流场数值模拟及工艺强化研究[D].哈尔滨:哈尔滨工业大学,2015.
- [6] 黄卫星,李建明,肖泽仪.工程流体力学[M].北京:化学工业出版社,2009.
- [7] 常青.絮凝动力学的现状与研究方法进展[J].环境科学学报,2015,35(10):3042-3049.
- [8] Aubin J, Fletcher D F, Xuereb C. Modeling turbulent flow in stirred tanks with CFD: The influence of the modeling approach, turbulence model and numerical scheme[J]. Experimental Thermal & Fluid Science, 2004, 28(5): 431-445.
- [9] Lee B J, Molz F. Numerical simulation of turbulence-induced flocculation and sedimentation in a flocculant-aided sediment retention pond[J]. Environmental Engineering Research, 2014, 19(2): 165-174.
- [10] 杨志浪,黄克文,周洋洋.基于计算流体力学的往复式隔板絮凝池流场模拟分析[J].给水排水,2009,45(S2):365-368.
- [11] Yang Z, Wu Z, Zeng G, et al. Assessing the effect of flow fields on flocculation of kaolin suspension using microbial flocculant GA1[J]. Rsc Advances, 2014, 4(76): 40464-40473.
- [12] Bridgeman J, Jefferson B, Parsons S. Assessing floc strength using CFD to improve organics removal[J]. Chemical Engineering Research & Design, 2008, 86(8): 941-950.
- [13] Sun R, Xiao H, Sun H. Investigating the settling dynamics of cohesive silt particles with particle-resolving simulations[J]. Advances in Water Resources (2017). <https://doi.org/10.1016/j.advwatres>.
- [14] Ruan Z E, Li C P, Shi C. Numerical simulation of flocculation and settling behavior of whole-tailings particles in deepcone thickener[J]. Journal of Central South University, 2016, 23(3): 740-749.
- [15] Wang J, Wu Y, Zhang H. Numerical and experimental investigation on integrated flocculation-membrane filtration process for the reactor configuration design and operational parameter optimization[J]. Desalination, 2014, 347(17): 184-190.
- [16] Zhou T, Li M, Zhou C, et al. Numerical simulation and optimization of red mud separation thickener with self-dilute feed[J]. Journal of Central South University, 2014, 21(1): 344-350.
- [17] Mohammadighavam S, Heiderscheidt E, Marttila H, et al. Optimization of gravity-driven hydraulic flocculators to treat peat extraction runoff water[J]. Journal of Irrigation & Drainage Engineering, 2016, 142(2): 1237-1245.
- [18] 吴成娟.平流式沉淀池的数值模拟[D].合肥:合肥工业大学,2010:84.
- [19] 邹琳.水处理絮凝动力学的试验研究和数字模拟[D].南京:河海大学,2007.
- [20] Ren P, Nan J. CFD and experimental studies on the impact of impeller type on flow field and floc size evolution in a stirred tank[C]. International Conference on Advances in Energy and Environmental Science, 2015. ■