

DOI:10.19853/j.zgjsps.1000-4602.2021.16.007

# 供水管网水质微观机理模型研究及应用进展

林晓丹<sup>1,2</sup>, 陈方亮<sup>3</sup>, 强志民<sup>1,2</sup>, 徐 强<sup>1</sup>

(1. 中国科学院生态环境研究中心 饮用水科学与技术重点实验室, 北京 100085;

2. 中国科学院大学, 北京 100049; 3. 郑州力通水务有限公司, 河南 郑州 071000)

**摘 要:** 管网水质模型是评价供水管网水质、预测水质变化的有效工具。随着管网水质变化机理研究的不断深入,水质模型也不断完善。其中,微观机理模型是一个重要分支,因此有必要重点关注管网水质变化的影响因素及其机理。首先,以余氯衰减模型为例,介绍了模拟单一化学物质转化的微观机理模型的原理;其次,基于余氯衰减、消毒副产物生成、微生物生长模型,重点论述了模拟多物质反应过程的微观机理模型的研究进展;最后,总结了微观机理模型的应用。

**关键词:** 供水管网; 水质模型; 微观机理模型

**中图分类号:** TU991 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-4602(2021)16-0041-08

## Research and Application Progress on Micro-mechanism Models of Water Quality in Drinking Water Distribution Systems

LIN Xiao-dan<sup>1,2</sup>, CHEN Fang-liang<sup>3</sup>, QIANG Zhi-min<sup>1,2</sup>, XU Qiang<sup>1</sup>

(1. Key Laboratory of Drinking Water Science and Technology, Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100085, China; 2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China; 3. Zhengzhou Litong Water Service Co. Ltd., Zhengzhou 071000, China)

**Abstract:** Water quality model is an effective tool to evaluate the water quality and predict the water quality changes in drinking water distribution systems (DWDSs). The models are constantly improved with a continuous research progress on water quality change mechanism in DWDSs. Among the available models, the micro-mechanism models represent an important branch, which primarily focus on the influencing factors and the mechanism of water quality changes. The principle of micro-mechanism models that simulate the fate of a single chemical is first introduced by taking chlorine residual decay models as examples; and then, the latest research progress on micro-mechanism models that simulate multiple interactive chemical species is discussed based on chlorine residuals decay, disinfection by-products formation and microorganisms growing models; finally, the application of micro-mechanism models to DWDSs is summarized.

**Key words:** DWDSs; water quality models; micro-mechanism models

基金项目: 国家水体污染控制与治理科技重大专项(2017ZX07501-002、2017ZX07108-002); 中国科学院青年创新促进会项目(2019043)

通信作者: 徐强 E-mail: qiangxu@rcees.ac.cn

饮用水水质安全与人类健康息息相关,2015年联合国可持续发展峰会正式通过《改变我们的世界:2030年可持续发展议程》,将向所有人提供清洁的饮用水列为17个全球可持续发展目标之一<sup>[1]</sup>。保障用户龙头水水质达标是其必然要求。然而,由于饮用水在管网中输配时会发生复杂的物理、化学、微生物作用,导致龙头水水质相比出厂水会有一定程度的下降,甚至有时会出现不达标的情况。因此,研究管网水质的变化规律对保障龙头水水质达标具有重要的意义。但由于管网规模庞大、内部环境复杂,同时可能会受到漏损、爆管、外力破坏等突发性事件的影响,相较于保证出厂水水质达标,管网水质的安全保障更具挑战性。

水质监测是掌握管网水质变化规律的主要手段,但由于人力、物力、财力等因素的限制,无法监测每个节点的水质。因此,国内外学者越来越多地利用管网水质模型来模拟管网水质参数的反应过程、时空变化。管网水质模型可分为基于反应动力学的微观机理模型和基于历史数据的经验统计模型。其中,机理模型能较好地解释水质变化的根本原因,为深入认识管网水质变化的机理提供了重要的方法。为此,归纳国内外管网水质机理模型研究及应用的新进展,以期对相关研究人员提供参考。

## 1 微观反应机理模型的研究进展

目前,管网水中各物质之间的反应动力学机理研究及水质模型建立主要关注四方面:①水力条件对管网水质的影响。流态影响水相中组分的混合、扩散及其在水相与管壁之间的质量传输速率。②进水水质对管网水质的影响。水厂工艺改进、水源切换等非正规进水水质变化及二次加氯等将导致管网内环境改变<sup>[2]</sup>。③温度对管网水质的影响。温度影响化学反应速率、微生物生长速率,同时影响污染物及致病菌的吸附等<sup>[2]</sup>。④管垢及生物膜对管网水质的影响。管垢中的某些成分能促进消毒剂的衰减及消毒副产物(DBPs)生成<sup>[3]</sup>,管壁生物膜的成分也可作为DBPs前驱物生成DPBs<sup>[4-5]</sup>。根据模型考虑的反应物数量,这些研究可分为模拟单一物质变化的微观机理模型(简称单物质模型)和模拟多种物质反应的微观机理模型(简称多物质模型)。

### 1.1 单物质模型

单物质模型将研究对象的浓度变化描述为仅与自身浓度和时间有关的函数。余氯衰减模型是目前

研究、应用最多的单物质模型。Rossman等<sup>[6]</sup>基于余氯在水体和管壁上反应的动力学机制推导出一级衰减模型,如下所示:

$$\frac{dC_{Cl}}{dt} = -\left[k_b + \frac{4(k_f \times k_w)}{D(k_f + k_w)}\right]C_{Cl} = -k_{first}C_{Cl} \quad (1)$$

式中: $C_{Cl}$ 为 $t$ 时刻的余氯量; $t$ 为反应时间; $k_b$ 为水相中余氯衰减速率系数; $k_w$ 为管壁上余氯衰减速率系数; $k_f$ 为余氯在水相及管壁上的传质系数; $D$ 为管道直径; $k_{first}$ 为余氯的一级衰减速率系数。

美国环保署开发的EPANET采用下式表达不同级数的余氯衰减模型:

$$\frac{dC_{Cl}}{dt} = -k_n(C_{Cl} - C_L)C_{Cl}^{n-1} \quad (2)$$

式中: $C_L$ 为余氯的极限浓度; $k_n$ 为 $n$ 级衰减速率系数; $n$ 为反应级数。

Kim等<sup>[7]</sup>提出了余氯衰减的组合模型,包括一级与 $n$ 级组合模型[见式(3)], $M$ 级与 $n$ 级( $M, n$ 均大于1)组合模型[见式(4)],并对比了组合模型与一级[式(1)]、二级[式(2)中 $n=2$ ]、 $n$ 级[式(2)]等余氯衰减模型的模拟效果。结果表明,组合模型在模拟非稳态条件下的余氯衰减时具有明显优势。

$$C_{Cl} = C_L + w(C_{Cl,0} - C_L)\exp(-k_{first}t) + \{k_n t(n-1) + \left[\frac{1}{(1-w)(C_{Cl,0} - C_L)}\right]^{(n-1)}\}^{-\frac{1}{n-1}} \quad (3)$$

$$C_{Cl} = C_L + \{k_M t(M-1) + \left[\frac{1}{w(C_{Cl,0} - C_L)}\right]^{(M-1)}\}^{-\frac{1}{M-1}} + \{k_n t(n-1) + \left[\frac{1}{(1-w)(C_{Cl,0} - C_L)}\right]^{(n-1)}\}^{-\frac{1}{n-1}} \quad (4)$$

式中: $w$ 为权重系数; $C_{Cl,0}$ 为初始加氯量; $M$ 为余氯衰减的动力学级数; $k_M$ 为余氯的 $M$ 级衰减速率系数。

上述余氯衰减的单物质模型的形式相对简单、应用方便,其中一级衰减模型是目前最常用的余氯衰减模型。

### 1.2 多物质模型

管网水质变化过程涉及多种物质在水相、管壁、管垢及生物膜等多相内的迁移和反应,同时包含物理、化学、生物作用,是典型的复合体系。因此,多数水质问题只能通过多物质模型来综合分析。目前,

已建立余氯衰减、DBPs生成、微生物再生长等涉及其中,余氯衰减模型和DBPs生成模型研究较多,其多种物质变化及反应过程的微观机理模型<sup>[8~29]</sup>。模型表达形式与适用条件如表1所示。

表1 典型多物质管网水质模型

Tab.1 Information of typical multi-species water quality models

序号	水质指标	模型表达式	适用场景	模型出处
1	水相余氯	$\frac{dC_{Cl}}{dt} = -k_{\text{second}} C_{Cl} C_Z = -k_{\text{second}} C_{Cl} \left[ C_{Z,0} - \frac{b}{a} (C_{Cl,0} - C_{Cl}) \right]$ $= -k_1 C_{Cl} - k_2 C_{Cl}^2$	适合模拟初始加氯量变化较小的情况	Hua等 <sup>[8]</sup> 及Clark等 <sup>[9]</sup>
2	水相余氯	$\frac{dC_{Cl}}{dt} = -k_F C_F C_{Cl} - k_S C_S C_{Cl}$	模拟初始阶段余氯衰减较快、后续较慢的情况	Kastl等 <sup>[10]</sup>
3	水相余氯	$\frac{dC_{Cl}}{dt} = -k C_{Cl} C_Z = -k C_{Cl} \left[ C_{Z,0} - \frac{b}{a} (C_{Cl,0} - C_{Cl}) \right], 0 \leq t \leq t_b$ $\frac{dC_{Cl}}{dt} = -k C_{Cl} \left[ C_{Z,t_b} - \frac{b}{a} (C_{Cl,0}^* - C_{Cl}) \right],$ $C_{Z,t_b} = C_{Z,0} - \frac{b}{a} (C_{Cl,0} - C_{Cl,t_b}), t \geq t_b$	模拟二次加氯及初始加氯量改变时的余氯衰减	Boccelli等 <sup>[11]</sup>
4	水相余氯	$\frac{dC_{Cl}}{dt} = -C_{Cl} \sum_{i=1}^n k_i C_{Z,i} = -k_i C_Z C_{Cl}; \frac{dk_i}{dt} = -\alpha (k_i - k_{\min}) k_i C_{Cl}$	对较大范围投氯量和多种二次加氯情况均适用,针对一个给定水体仅需要一组参数而不依赖于初始加氯量	Jonkerougou等 <sup>[12]</sup>
5	水相余氯	$\frac{dC_{Cl}}{dt} = -k_F C_F C_{Cl} - k_S C_S C_{Cl}; k_{j,T} = k_{j,20} \times e^{\frac{-E/R \times (20-T)}{(273+20) \times (273+T)}}$	适用于水温变化大导致余氯衰减速率变化大的情况	Fisher等 <sup>[15]</sup>
6	管壁上余氯	$r_w = \frac{A}{1 + A/k_f \times e^{-BC_{Cl}}} e^{-BC_{Cl}} C_{Cl}$	适用于分析管壁微生物活动及反应组分在水相、管壁两相之间传输速率对余氯衰减的影响	Fisher等 <sup>[16]</sup>
7	水相 THMs	$DBP_i = y_i \left[ C_{Cl,0} - \frac{C_{Cl,0}(1-m)}{1-me^{-vt}} \right]$	适于模拟单一类型DBPs及总量	Clark等 <sup>[19]</sup>
8	水相 THMs	$C_{THMs} = y_{THMs} C_{Cl,0} [1 - fe^{-k_{FT}} - (1-f)e^{-k_{ST}}]$	适用于模拟余氯先快后慢衰减情况下的THMs生成	Gang等 <sup>[20]</sup>
9	管网中THMs	$\frac{dC_{THMs}}{dt} = k_{THMs} C_{Cl} (C_{THMsFP} - C_{THMs})$	适用于可测定THMs生成势的情况	李欣等 <sup>[21]</sup>
10	管网中THMs	$\frac{dC_{Cl}}{dt} = -k_{Cl,X} C_{Cl} X_b - k_{Cl,N} C_{Cl} N_b; \frac{dX_b}{dt} = -Y_X k_{Cl,X} C_{Cl} X_b$ $\frac{dC_{THMs}}{dt} = Y_{H,1} k_{Cl,N} C_{Cl} N_b + Y_{H,2} k_{Cl,X} C_{Cl} X_b$	适用于由微生物派生的THMs前驱物对THMs生成贡献较大情况,但需要较多数据率定模型参数	Abokifa等 <sup>[4]</sup>

注: 模型表达式中, $C_Z$ 、 $C_{Z,0}$ 为分别为 $t$ 时刻及0时刻水相中所有与余氯反应的物质的浓度; $k_{\text{second}}$ 、 $k_1$ 、 $k_2$ 分别为余氯的衰减速率系数; $C_F$ 、 $C_S$ 分别为参与快、慢反应的有机物浓度; $k_F$ 、 $k_S$ 分别为快、慢反应速率系数; $t_b$ 为二次加氯时刻; $C_{Z,t_b}$ 、 $C_{Cl,t_b}$ 分别为二次加氯前一刻所有与余氯反应的物质浓度及余氯浓度; $C_{Cl,0}^*$ 为二次加氯后余氯浓度; $a$ 、 $b$ 分别为化学反应方程式系数; $k_i$ 、 $C_{Z,i}$ 分别为 $t$ 时刻第 $i$ 种物质与余氯反应的速率系数及第 $i$ 种物质的浓度; $k_i$ 为 $t$ 时刻所有物质与余氯反应的平均反应速率系数; $\alpha$ 、 $m$ 为无量纲数; $k_{\min}$ 为 $k_i$ 最小值; $k_{j,T}$ 、 $k_{j,20}$ 分别为 $T$ ℃及20℃时快、慢反应速率系数; $R$ 为摩尔气体常数,8.314 J/(mol·K); $E$ 为反应活化能,可视为与温度无关的常数; $r_w$ 为管壁上表观余氯衰减速率; $A$ 为放大系数; $B$ 为余氯对微生物灭活速率系数; $DBP_i$ 为第 $i$ 种DBPs; $v$ 为反应速率; $C_{THMs}$ 为THMs浓度; $C_{THMsFP}$ 为THMs生成势浓度; $y_i$ 、 $y_{THMs}$ 分别为消耗单位浓度余氯生成第 $i$ 种DBPs和THMs的浓度; $f$ 为参与快反应的余氯比例; $k_{THMs}$ 为THMs的生成速率系数; $k_{Cl,X}$ 、 $k_{Cl,N}$ 分别为余氯与生物物质及NOM反应的速率系数; $X_b$ 为水中生物物质的浓度; $Y_X$ 为产率系数,单位余氯消耗的生物物质的活性位点数; $Y_{H,1}$ 、 $Y_{H,2}$ 分别为NOM及生物物质消耗单位余氯生成的THMs; $N_b$ 为水中天然有机物NOM的浓度。

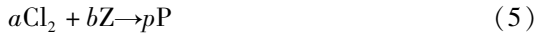
### 1.2.1 余氯衰减模型

余氯衰减模型研究包括水相反应和管壁反应两方面,水相反应的研究较多。水相中余氯衰减的根本原因是水中还原性物质对余氯的消耗。Hua等<sup>[8]</sup>

及Clark等<sup>[9]</sup>认为水中余氯衰减是由余氯与还原性物质发生反应引起的,余氯衰减速率相对余氯和还原性物质均为一级反应,按照式(5)所示的化学反应方程式,余氯衰减可转化为混合级数模型,如表1



中模型1所示。该模型可以合理解释初始阶段余氯衰减较快的现象。



式中: $p$ 为化学反应方程式系数; $\text{Cl}_2$ 、 $\text{Z}$ 、 $\text{P}$ 分别为余氯、与余氯反应的物质及产物。

Kastl等<sup>[10]</sup>按照水中还原性有机物与余氯反应活性的高低,将还原性物质划分为参与快速、慢速反应两类,提出了包含快慢反应的平行二级余氯衰减模型(表1中模型2),该模型合理解释了余氯衰减速率初始阶段较高、后续阶段较低的现象。

除耗氯物质外,水中余氯衰减速率与余氯浓度 $C_{\text{Cl}}$ 及速率常数紧密相关。 $C_{\text{Cl}}$ 和余氯衰减速率系数均随出厂水的投氯量、二次加氯量而改变,而这两种方式是供水行业最常用的保障龙头水水质安全的措施,因此研究 $C_{\text{Cl}}$ 、余氯衰减速率系数在上述工况改变时的变化规律有助于准确模拟余氯衰减速率。Boccelli等<sup>[11]</sup>针对二次加氯引起节点 $C_{\text{Cl}}$ 非连续变化及后续管网余氯衰减速率改变的问题,在余氯二级衰减模型基础上,提出可依据加氯量相应调整模型参数的二级衰减模型(表1中模型3)。Jonkergouw等<sup>[12]</sup>针对余氯衰减速率系数随着初始加氯量和二次加氯改变而变化的问题,采用等效方程简化所有与氯反应物质的平均反应速率动力学方程,提出了速率系数可变的余氯衰减模型(表1中模型4)。

此外,Li等<sup>[13]</sup>调研了1998年—2017年20年间的161篇研究消毒稳定性的文章,发现水温是影响余氯量的重要因素。但目前仅有少数研究将温度效应带入余氯衰减模型,Fisher等<sup>[14]</sup>对比了21种模拟水中余氯衰减的模型,仅有6个可以模拟温度对余氯的影响。另外,Fisher等<sup>[15]</sup>还定义了包含模型准确度、简洁性及能否模拟温度、初始加氯量变化及二次加氯量等在内的9条标准以评价余氯衰减模型的实用性,认为最实用的是包含快慢反应的平行二级模型(表1中模型2),并通过Arrhenius公式将温度影响带入模型(表1中模型5),该模型可用于指导水厂在不同季节对应调整加氯量。

管壁上的余氯衰减系数随管材、管龄、管径、流速不同而变化,不确定度较高。目前管壁上余氯衰减的机理模型常用EPANET中的零级或一级反应模型,但Fisher等<sup>[16]</sup>在实际管网中在线监测并同步取样测试,验证了管壁上的余氯消耗受微生物影响

较大,而不是化学反应,并提出包含微生物活动影响的管壁余氯衰减模型(表1中模型6)。Zhao等<sup>[17]</sup>研究发现,水力条件不仅影响余氯在管壁与水相之间的质量传输,同时很可能会导致管垢的脱落及沉积,进而影响管壁上的余氯衰减速率。

综上可知,多因素影响的余氯衰减模型涉及的关键参数包括初始加氯量、二次加氯量、温度、水力条件等。

### 1.2.2 DBPs生成模型

消毒过程会产生DBPs,因此在余氯衰减模型研究逐渐成熟的同时,DBPs模型研究也不断深入。Chowdhury等<sup>[18]</sup>总结了118个预测供水系统中DBPs生成的模型,发现多数是研究水中三卤甲烷(THMs)及卤乙酸生成的多元回归模型,仅6个是机理模型,且研究其他种类DBPs的较少。DBPs生成机理模型一般是基于余氯消耗和DBPs生成的化学反应方程式线性比例系数建立,如下式所示:

$$\frac{dC_{\text{DBPs}}}{dt} = y_{\text{DBPs}} \frac{dC_{\text{Cl}}}{dt} \quad (6)$$

式中: $C_{\text{DBPs}}$ 、 $y_{\text{DBPs}}$ 分别为DBPs浓度、消耗单位浓度余氯生成的DBPs浓度。

Clark等<sup>[19]</sup>用表1中模型1计算余氯消耗量,结合DBPs生成的化学反应方程式系数建立了DBPs生成模型(表1中模型7);Gang等<sup>[20]</sup>用不同的NOM与余氯反应,用表1中模型1模拟余氯衰减,发现不同分子质量的NOM与余氯反应生成的THMs总量也是耗氯量的函数(表1中模型8)。

与水处理过程中DBPs生成模型相比,DBPs在管网中生成的机理模型研究较少。李欣等<sup>[21]</sup>基于水中THMs生成势(THMsFP)的概念提出包含THMsFP的二级反应动力学模型(表1中模型9),较好地模拟了实际管网中THMs生成情况。Courtis等<sup>[22]</sup>连续12个月在实际管网中取样测定余氯消耗量与THMs生成量,发现管网中THMs与余氯消耗量之间也存在线性比例关系,但线性比例系数并不是恒定值,而是随THMs浓度增加而减小。

以上模型均未区分水相及管壁对THMs生成的贡献。Abokifa等<sup>[4]</sup>将THMs前驱物划分为水中的NOM及由微生物派生的THMs前驱物,将THMs生成的二级反应动力学模型扩展为包含管壁生物膜及水中微生物等前驱物的贡献的多物质模型(表1中模型10),以实际管网中的余氯及异养菌总数、中试

规模管网的 NOM 及 THMs 数据验证了模型,并将模型 9 与虚拟管网耦合进行了情境模拟,计算了不同水力条件下余氯、营养底物在水相和管壁上传质及管壁生物膜中生物脱落。结果显示,在雷诺数为 15 000 时,微生物作为 THMs 前驱物对 THMs 生成的贡献率最大,达到 12%。尽管国内外对 DBPs 的生成进行了大量研究,但目前极少有供水部门应用模型来进行消毒可持续性预测。

### 1.2.3 微生物再生长模型

除 DBPs 生成外,微生物再生长是评估消毒可持续性的另一个重要方面。由于不同细菌之间差异较大,且微生物检测结果波动较大,因此目前微生物再生长主要是定性研究,定量研究较少。已有的少数研究微生物再生长的机理模型常用生物可降解溶解性有机碳或生物可同化有机碳表示微生物生长底物浓度,用异养菌总数代表微生物量,用 Monod 方程模拟微生物生长动力学及基质利用,如下式所示:

$$\frac{dX}{dt} \Big|_{\text{growth}} = \mu X \quad (7)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\mu \frac{X}{Y} \quad (8)$$

$$\mu = \frac{\mu_{\max} S}{S + K_s} \quad (9)$$

式中: $X$  为微生物质量浓度; $\mu$ 、 $\mu_{\max}$  分别为比增长速度、最大比增长速度; $S$  为单一限制性底物浓度; $Y$  为产率系数,消耗单位底物转化为微生物的质量浓度; $K_s$  为半饱和常数。

微生物死亡包括自然死亡和氯消毒死亡,自然死亡速率符合一级模型,见式(10);氯消毒灭活与余氯浓度及微生物浓度有关,氯消毒灭活速率见式(11),对余氯、微生物浓度而言,均为一级反应<sup>[23]</sup>。

$$\frac{dX}{dt} \Big|_{\text{mortality}} = k_{\text{mortality}} X \quad (10)$$

$$\frac{dX}{dt} \Big|_{\text{Cl}_2 \text{ mortality}} = k_d C_{\text{Cl}} X \quad (11)$$

式中: $k_{\text{mortality}}$  为微生物自然衰亡速率; $k_d$  为氯消毒导致的衰亡速率。

Zhang 等<sup>[24]</sup> 和 Abokifa 等<sup>[4]</sup> 基于式(7)~(9)描述了微生物生长过程,并将水相及管壁上微生物的衰亡速率简化为微生物质量浓度的函数,建立了微生物衰亡的一级动力学模型,并引入了余氯对微生物生长的抑制因子,然后与管网水力模型进行了耦合,模拟了管网中微生物的变化。周广宇等<sup>[25]</sup> 以管

网中菌落增殖为核心,围绕管网水中有有机物、氨氮、余氯、温度以及管壁等因素对菌落增殖的影响,建立了包含菌落自然死亡、余氯灭活菌落、死亡菌落对管壁微生物膜的吸附、生物膜内死亡菌落脱附和死亡菌落溶解等过程的细菌增殖的微观机理模型,比较全面地反映了管网中菌落变化的过程。陈国强等<sup>[26]</sup> 通过试验验证了流速对管壁微生物膜脱离及扩散的影响,并进一步构建了包含流速影响的微生物模型,该模型将为更加全面地研究微生物在管网非稳态条件下的生长情况提供重要参考。

尽管国内外学者对管网中微生物再生长有一定研究,但对致病菌的再生长、除余氯之外其他消毒剂作用下的微生物再生长、细菌种间竞争关系的模型研究较少。另外,模型在实际管网中应用比较少,主要原因是微生物的测定具有一定的滞后性,比较难以在线监测,从而缺乏管网实际监测数据来率定模型参数<sup>[27]</sup>。但随着微生物在线监测技术的发展,这一问题有望得到解决。Besmer 等<sup>[28]</sup> 以自动采样系统协同流式细胞仪原位监测管网龙头水微生物的动态变化,15 min 自动监测一次细胞总数,证实了借助流式细胞仪实现微生物在线监测的可行性。Hojris 等<sup>[29]</sup> 开发了新型光学在线传感器在线监测微生物,通过移动传感器中的数字显微镜对管网水进行 3D 扫描,分辨细菌及颗粒物,实现微生物的在线监测。目前这些微生物在线监测方法主要用于识别突发的污染事故及风险管理等,未来有望基于微生物在线监测数据建立并率定微生物变化的微观机理模型,促进其应用。

## 2 微观反应机理模型的应用

微观反应机理模型描述了物质之间的反应过程,但管网中水质的变化不仅受物质自身反应过程的影响,还与不同水力条件下物质的迁移、混合、扩散过程息息相关,仅用反应机理模型无法得到物质浓度在管网尺度上的时空变化规律。因此,机理模型最重要的一个应用是与管网水力模型耦合得到管网水质数值模型。

美国环保署推出的 EPANET 及 EPANET-MSX 考虑了物质的对流传输、在管道节点和蓄水设施中的混合、在水体和管壁两相的反应等三个过程,来描述管网水质的变化<sup>[30]</sup>。

### ① 物质的对流传输及动态反应

溶解性物质与流体以相同平均流速沿着管道迁

移,同时以一定速率反应,如下式所示:

$$\frac{\partial C_i(x,t)}{\partial t} = -u_i \frac{\partial C_i(x,t)}{\partial x} + R[C_i(x,t)] \quad (12)$$

式中: $C_i(x,t)$ 为管道*i*中物质的浓度,是距离*x*和时间*t*的函数; $u_i$ 为管道*i*中的流速; $R[C_i(x,t)]$ 为反应物的反应速率表达式。

## ② 物质在管道节点的混合

物质在管道节点的混合遵循下式:

$$C_{i,x=0} = \frac{\sum_{j \in I_k} Q_j C_{j,x=L_j} + Q_{k,ext} C_{k,ext}}{\sum_{j \in I_k} Q_j + Q_{k,ext}} \quad (13)$$

式中:*i*为节点*k*的下游管段; $I_k$ 为节点*k*的上游管段集; $L_j$ 为管段*j*的长度; $Q_j$ 为管段*j*的流量; $Q_{k,ext}$ 为节点*k*处进入管网的外部流量; $C_{k,ext}$ 为进入节点*k*外部流量的质量浓度; $C_{i,x=0}$ 为管段*i*起点处的物质浓度; $C_{j,x=L_j}$ 为管段*j*末端的物质浓度。

其中,EPANET主要模拟单物质的变化,Rossman等<sup>[6]</sup>基于EPANET用余氯一级衰减动力学模型准确地模拟了美国某实际管网中余氯变化;EPANET-MSX则可模拟多物质的反应及迁移过程,用户可根据不同物质的反应机理自定义多物质反应动力学,并与水力模型进行耦合。例如,Burkhardt等<sup>[31]</sup>用EPANET-MSX模拟了砷在管网中的氧化、在管壁上吸附等过程。目前EPANET及EPANET-MSX已成为最常用的模拟管网水质变化的工具。除了完善物质反应的微观机理模型外,管网水质模型也通过改进对流迁移过程中物质的扩散及节点混合算法等<sup>[32-33]</sup>提高了模型准确度。

基于EPANET及EPANET-MSX的管网水质模型在实际供水过程中逐渐被应用。最常用的是余氯衰减模型,主要用于管网管理和设计两方面。在管网管理方面,通过模拟管网节点余氯量评价管网水质,反馈指导调节出厂水水质、调整二次加氯量等<sup>[34]</sup>;在管网设计方面,可基于管网水质模型来评价设计方案能否满足管网水质要求,进而对设计方法进行优化,例如基于余氯衰减模型计算新增水箱、泵、管道后各个节点的余氯量,进而优化选取二次加氯点的位置或辅助划分管网分区等<sup>[35]</sup>。

## 3 结论与建议

随着研究的不断深入,管网水质模型从最简单的余氯衰减单物质模型发展到多物质模型,一方面,已建立了多种适于模拟二次加氯、初始加氯量改变、

水温变化、余氯先快后慢衰减等情况的余氯衰减模型;另一方面,基于余氯衰减模型建立了DBPs生成及微生物再生长模型。然而,目前管网水质模型研究主要集中在与消毒相关的方面,而且由于模型在不同工况下的准确度和适用性难以保证,水质模型在实际中应用较少。未来可从以下方面开展研究:①研究不同工况下、不同管道特征下的管网水质变化规律,将管网运行中的水力条件和管道特征考虑到管网水质模型中,从而提高模型对不同应用场景的适用性;②研究其他关键水质指标(如重金属、条件致病菌等)变化的微观反应机理,并建立相关模型,为更加全面地保障管网水质安全提供支撑。

## 参考文献:

- [1] United Nations General Assembly. Transforming Our World: the 2030 Agenda for Sustainable Development [R]. US: the United Nations, 2015.
- [2] LIU G, ZHANG Y, KNIBBE W J, *et al.* Potential impacts of changing supply-water quality on drinking water distribution: a review [J]. *Water Research*, 2017, 116: 135 - 148.
- [3] SHARMA V K, YANG X, CIZMAS L, *et al.* Impact of metal ions, metal oxides, and nanoparticles on the formation of disinfection byproducts during chlorination [J]. *Chemical Engineering Journal*, 2017, 317: 777 - 792.
- [4] ABOKIFA A A, YANG Y J, LO C S, *et al.* Investigating the role of biofilms in trihalomethane formation in water distribution systems with a multicomponent model [J]. *Water Research*, 2016, 104: 208 - 219.
- [5] XU J N, HUANG C H, SHI X Y, *et al.* Role of drinking water biofilms on residual chlorine decay and trihalomethane formation: an experimental and modeling study [J]. *Science of the Total Environment*, 2018, 642: 516 - 525.
- [6] ROSSMAN L A, CLARK R M, GRAYMAN W M. Modeling chlorine residuals in drinking-water distribution systems [J]. *Journal of Environmental Engineering*, 1994, 120(4): 803 - 820.
- [7] KIM H, KIM S. Evaluation of chlorine decay models under transient conditions in a water distribution system [J]. *Journal of Hydroinformatics*, 2017, 19(4): 522 - 537.
- [8] HUA F, WEST J R, BARKER R A, *et al.* Modelling of chlorine decay in municipal water supplies [J]. *Water Research*, 1999, 33(12): 2735 - 2746.



- [9] CLARK R M. Chlorine demand and TTHM formation kinetics: a second-order model [J]. Journal of Environmental Engineering, 1998, 124(1): 16–24.
- [10] KASTL G J, FISHER I H, JEGATHEESAN V. Evaluation of chlorine decay kinetics expressions for drinking water distribution systems modelling [J]. AQUA, 1999, 48(6): 219–226.
- [11] BOCCELLI D L, TRYBY M E, UBER J G, *et al.* A reactive species model for chlorine decay and THM formation under rechlorination conditions [J]. Water Research, 2003, 37(11): 2654–2666.
- [12] JONKERGOUW P M R, KHU S T, SAVIC D A, *et al.* A variable rate coefficient chlorine decay model [J]. Environmental Science & Technology, 2009, 43(2): 408–414.
- [13] LI R A, MCDONALD J A, SATHASIVAN A, *et al.* Disinfectant residual stability leading to disinfectant decay and by-product formation in drinking water distribution systems: a systematic review [J]. Water Research, 2019, 153: 335–348.
- [14] FISHER I, KASTL G, SATHASIVAN A, *et al.* Suitability of chlorine bulk decay models for planning and management of water distribution systems [J]. Critical Reviews in Environmental Science and Technology, 2011, 41(20): 1843–1882.
- [15] FISHER I, KASTL G, SATHASIVAN A. A suitable model of combined effects of temperature and initial condition on chlorine bulk decay in water distribution systems [J]. Water Research, 2012, 46(10): 3293–3303.
- [16] FISHER I, KASTL G, SATHASIVAN A. New model of chlorine-wall reaction for simulating chlorine concentration in drinking water distribution systems [J]. Water Research, 2017, 125(1/2): 427–437.
- [17] ZHAO Y Y, YANG Y J, SHAO Y, *et al.* The dependence of chlorine decay and DBP formation kinetics on pipe flow properties in drinking water distribution [J]. Water Research, 2018, 141: 32–45.
- [18] CHOWDHURY S, CHAMPAGNE P, MCLELLAN P J. Models for predicting disinfection byproduct (DBP) formation in drinking waters: a chronological review [J]. Science of the Total Environment, 2009, 407(14): 4189–4206.
- [19] CLARK R M. Predicting the formation of chlorinated and brominated by-products [J]. Journal of Environmental Engineering, 2001, 127(6): 493–501.
- [20] GANG D C, CLEVENGER T E, BANERJI S K. Relationship of chlorine decay and THMs formation to NOM size [J]. Journal of Hazardous Materials, 2003, 96(1): 1–12.
- [21] 李欣, 张继良, 王郁萍, 等. 配水管网水质变化的研究(Ⅲ)——三卤甲烷的研究 [J]. 哈尔滨建筑大学学报, 2000, 33(2): 58–61.
- LI Xin, ZHANG Jiliang, WANG Yuping, *et al.* Studying of the THM in water distribution system [J]. Journal of Harbin University of Civil Engineering & Architecture, 2000, 33(2): 58–61 (in Chinese).
- [22] COURTIS B J, WEST J R, BRIDGEMAN J. Chlorine demand-based predictive modeling of THM formation in water distribution networks [J]. Urban Water Journal, 2009, 6(6): 407–415.
- [23] 周德柱. 给水管网微生物变化与模拟研究 [D]. 重庆: 重庆大学, 2015.
- ZHOU Dezhu. The Study and Simulation of Microorganism in Drinking Water Distribution [D]. Chongqing: Chongqing University, 2015 (in Chinese).
- [24] ZHANG W D, MILLER C T, DIGIANO F A. Bacterial regrowth model for water distribution systems incorporating alternating split-operator solution technique [J]. Journal of Environmental Engineering, 2004, 130(9): 932–941.
- [25] 周广宇, 莫罹, 赵新华, 等. 基于多组分水质模型的供水管网细菌风险研究 [J]. 中国给水排水, 2016, 32(5): 64–69, 73.
- ZHOU Guangyu, MO Li, ZHAO Xinhua, *et al.* Assessment of bacteria risk in water distribution system based on multi-species water quality model [J]. China Water & Wastewater, 2016, 32(5): 64–69, 73 (in Chinese).
- [26] 陈国强. 供水管网微生物生长模型构建及特性研究 [D]. 重庆: 重庆大学, 2018.
- CHEN Guoqiang. Research on Microbial Growth Model and Characteristic in Water Distribution System [D]. Chongqing: Chongqing University, 2018 (in Chinese).
- [27] 鲁巍, 张晓健. 给水管网细菌生长的动力学模型 [J]. 中国给水排水, 2006, 22(18): 8–10.
- LU Wei, ZHANG Xiaojian. Dynamic model of bacteria growth in water distribution system [J]. China Water & Wastewater, 2006, 22(18): 8–10 (in Chinese).
- [28] BESMER M D, WEISSBRODT D G, KRATOCHVIL B

(下转第53页)