

УДК 519.6:628.33

DOI: 10.30838/UJCEA.2312.271224.55.1111

АНАЛІЗ ПРОЦЕСІВ МАСОПЕРЕНОСУ НА БАЗІ ЧИСЕЛЬНИХ МОДЕЛЕЙ

БІЛЯЄВ М. М.¹, *докт. техн. наук, проф.*,
ТИМОШЕНКО О. А.^{2*}, *канд. техн. наук, доц.*,
КАЛАШНИКОВ А. В.³, *асп.*,
КОВАЛЕНКО А. С.⁴, *асп.*,
ЧІРКОВ А. О.⁵, *асп.*

¹ Кафедра гідравліки, водопостачання та фізики, Український державний університет науки і технологій, вул. Лазаряна, 2, 49010, Дніпро, Україна, тел. +38 (056) 373-15-09, e-mail: biliaiev.m@gmail.com, ORCID ID: 0000-0002-1531-7882

^{2*} Кафедра екології та охорони навколишнього середовища, Український державний університет науки і технологій, ННІ «Придніпровська державна академія будівництва та архітектури», вул. Архітектора Олега Петрова, 24-а, 49005, Дніпро, Україна, тел. +38 (050) 452-43-63, e-mail: mitomdnipro1997@gmail.com, ORCID ID: 0000-0003-3114-9820

³ Кафедра гідравліки, водопостачання та фізики, Український державний університет науки і технологій, вул. Лазаряна, 2, 49010, Дніпро, Україна, тел. +38 (056) 373-15-09, e-mail: water.supply.treatment@gmail.com, ORCID ID: 0009-0001-8671-0446

⁴ Кафедра гідравліки, водопостачання та фізики, Український державний університет науки і технологій, вул. Лазаряна, 2, 49010, Дніпро, Україна, тел. +38 (056) 373-15-09, e-mail: water.supply.treatment@gmail.com, ORCID ID: 0009-0009-9761-4300

⁵ Кафедра гідравліки, водопостачання та фізики, Український державний університет науки і технологій, вул. Лазаряна, 2, 49010, Дніпро, Україна, тел. +38 (056) 373-15-09, e-mail: water.supply.treatment@gmail.com, ORCID ID: 0000-0002-1531-5892

Анотація. *Постановка проблеми.* Аеротенки та відстійники найбільш поширено використовуються в технологічних схемах очищення стічних вод. Важливою проблемою є розробка ефективних спеціалізованих математичних моделей для аналізу ефективності роботи цих споруд водовідведення. *Мета роботи.* Розробка чисельних моделей для розрахунку процесів масопереносу у біологічних реакторах та відстійниках систем водовідведення. *Методика.* Для опису процесів механічного та біологічного очищення стічних вод використовуються фундаментальні рівняння механіки суцільного середовища. Для моделювання процесу переносу активного мулу, кисню та субстрату в біологічному реакторі використовуються тривимірні рівняння масопереносу. Для опису руху забруднювача у відстійнику використовується 3D рівняння конвективно-дифузійного переносу вагової консервативної домішки. Гідродинаміка в очисних спорудах описується просторовим рівнянням Лапласу для потенціала швидкості. Для чисельного інтегрування моделюючих рівнянь використовуються кінцево-різницеві схеми. *Наукова новизна.* В статті розглянуті чисельні моделі для визначення концентрації кисню, активного мулу, субстрату в біореакторі. Запропоновані чисельні моделі для аналізу ефективності процесу очищення стічних вод у відстійниках. Побудовані чисельні моделі визначення поля швидкості потоку стічних вод в біореакторах та відстійниках. Запропоновані математичні моделі можуть бути використані для оцінювання ефективності роботи споруд, що здійснюють механічне та біологічне очищення стічних вод. *Практична значущість.* Запропоновані чисельні моделі для визначення поля швидкості в аеротенках та відстійниках, а також чисельні моделі для рішення задач оцінювання ефективності очищення стічних вод в цих спорудах. Розроблені чисельні моделі дозволяють швидко, в режимі «on-line», вирішувати прикладні задачі. *Висновки.* Здійснена програмна реалізація розробленої чисельної моделі. Наведено результати обчислювального експерименту.

Ключові слова: *очистка стічних вод; біореактор; відстійник; чисельне моделювання; водокористування*

ANALYSIS OF MASS TRANSFER PROCESSES BASED ON NUMERICAL MODELS

BILIAIEV M.M.¹, *Dr. Sc. (Tech.), Prof.*,
TYMOSHENKO O.A.^{2*}, *Cand. Sc. (Tech.), Assoc. Prof.*,
KALASHNYKOV A.V.³, *Postgrad. Stud.*,
KOVALENKO A.S.⁴, *Postgrad. Stud.*,
CHIRKOV A.O.⁵, *Postgrad. Stud.*

¹ Department of Hydraulics, Water Supply and Physics, Ukrainian State University of Science and Technologies, 2, Lazaryana St., Dnipro, 49010, Ukraine, tel. +38 (056) 373-15-09, e-mail: biliaev.m@gmail.com, ORCID ID: 0000-0002-1531-7882

^{2*} Department of Ecology and Environmental Protection, Ukrainian State University of Science and Technologies, ESI "Prydniprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture", 24-a, Architect Oleh Petrov St., Dnipro, 49005, Ukraine, tel. +38 (050) 452-43-63, e-mail: mitomdnipro1997@gmail.com, ORCID ID: 0000-0003-3114-9820

³ Department of Hydraulics, Water Supply and Physics, Ukrainian State University of Science and Technologies, 2, Lazaryana St., Dnipro, 49010, Ukraine, tel. +38 (056) 373-15-09, e-mail: water.supply.treatment@gmail.com, ORCID ID: 0009-0001-8671-0446

⁴ Department of Hydraulics, Water Supply and Physics, Ukrainian State University of Science and Technologies, 2, Lazaryana St., Dnipro, 49010, Ukraine, tel. +38 (056) 373-15-09, e-mail: water.supply.treatment@gmail.com, ORCID ID: 0009-0009-9761-4300

⁵ Department of Hydraulics, Water Supply and Physics, Ukrainian State University of Science and Technologies, 2, Lazaryana St., Dnipro, 49010, Ukraine, tel. +38 (056) 373-15-09, e-mail: water.supply.treatment@gmail.com, ORCID ID: 0000-0001-7467-5892

Abstract. Problem statement. Aeration tanks and settling tanks are most commonly used in wastewater treatment processes. An important problem is the development of effective specialized mathematical models for analyzing the efficiency of these wastewater treatment facilities. *The purpose of the article.* Development of numerical models for calculating mass transfer processes in biological reactors and settling tanks of wastewater systems. **Methodology.** To describe the processes of mechanical and biological wastewater treatment, fundamental equations of continuum mechanics are used. To model the process of activated sludge, oxygen and substrate transport in a biological reactor, three-dimensional mass transfer equations are used. To describe the movement of a pollutant in a settling tank, a 3D equation of convective-diffusion transport of a significant conservative impurity is used. Hydrodynamics in treatment plants is described by the spatial Laplace equation for the velocity potential. Finite-difference schemes are used for numerical integration of the modeling equations. **Scientific novelty.** The article considers numerical models for determining the concentration of oxygen, activated sludge, substrate in a bioreactor. Numerical models are proposed for analyzing the efficiency of the wastewater treatment process in settling tanks. Numerical models are built for determining the field of wastewater flow velocity in bioreactors and settling tanks. The proposed mathematical models can be used to assess the efficiency of structures that carry out mechanical and biological wastewater treatment. **Practical significance.** Numerical models for determining the velocity field in aeration tanks and settling tanks, as well as numerical models for solving problems of assessing the efficiency of wastewater treatment in these structures, are proposed. The developed numerical models allow for quick, on-line, solution of applied problems. **Conclusions.** The developed numerical model has been implemented in software. The results of the computational experiment are presented.

Keywords: wastewater treatment; bioreactor; settling tank; numerical modeling; water use

Постановка проблеми. Очистка стічних вод є дуже особо важливою проблемою в галузі водокористування [1–5; 6; 7; 13]. Для вирішення різноманітних задач очищення стічних вод використовуються різні споруди. Практично усі технологічні схеми очищення включають аеротенки та відстійники. На етапі проектування даних споруд очистки стічних вод потрібно мати спеціальні математичні моделі, а саме:

– емпіричні моделі, що базуються на використанні спрощених алгебраїчних співвідношень та використовуються в нормативних та інженерних методиках [2–4];

– аналітичні моделі, що базуються на використанні точних рішень рівнянь масопереносу [5; 12];

– CFD моделі, що базуються на використанні чисельних моделей гідродинаміки та масопереносу [1; 9–12].

Незважаючи на значну кількість математичних моделей, можна зазначити, що у зв'язку з дуже широким колом існуючих аеротенків, відстійників, залишається проблема створення ефективних математичних моделей для аналізу їх роботи.

Мета статті – розробка чисельних моделей для розрахунку процесів масопереносу у біологічних реакторах та відстійниках систем водовідведення.

Методика. Для опису процесів механічного та біологічного очищення стічних вод використовуються фундаментальні рівняння механіки суцільного середовища [1].

Математична модель кисневого режиму в споруді біологічного очищення стічних вод

Процес очистки стічних вод в аеротенку описується наступними рівняннями масопереносу :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial uS}{\partial x} + \frac{\partial vS}{\partial y} + \frac{\partial wS}{\partial z} = \quad (1)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial S}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial S}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial S}{\partial z} \right)$$

$$\frac{\partial X}{\partial t} + \frac{\partial uX}{\partial x} + \frac{\partial vX}{\partial y} + \frac{\partial wX}{\partial z} = \quad (2)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial X}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial X}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial X}{\partial z} \right),$$

$$\frac{\partial DO}{\partial t} + \frac{\partial uDO}{\partial x} + \frac{\partial vDO}{\partial y} + \frac{\partial wDO}{\partial z} = \quad (3)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial DO}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial DO}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial DO}{\partial z} \right) +$$

$$+ K_{La}(DO_{\max} - DO) + \frac{K_0 \mu X}{Y},$$

$$\frac{dX}{dt} = \mu X - K_d X \quad (4)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\mu}{Y} X \quad (5)$$

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{S}{S + K_s} \cdot \frac{DO}{k_{DO} + DO},$$

де t – час; $X(x, y, z, t)$ – концентрація активного мулу в біореакторі; $S(x, y, z, t)$ – концентрація субстрату в біореакторі; K_d – коефіцієнт, що враховує швидкість вимирання біомаси; DO – концентрація кисню в стічній воді; DO_{\max} – максимальне значення концентрації кисню в стічних водах; μ_x, μ_y, μ_z – коефіцієнти дифузії відповідно у напрямку x, y, z ; $u(x, y, z), v(x, y, z), w(x, y, z)$ – компоненти швидкості водного потоку в біореакторі; $K_0, K_s, K_{La}, \mu_{\max}, k_{DO}, Y$ – параметри [1].

Краєві умови для моделюючих рівнянь наведені в [1].

Чисельне інтегрування рівнянь (4), (5) здійснюється за допомогою метода Ейлера. Рішення моделюючих рівнянь (1)–(3) здійснюється за допомогою кінцево-різницевої схем. Приклад такої схеми наведено нижче для узагальненого рівняння масопереносу, де C – це концентрація речовини в біореакторі (кисень, субстрат, активний мул) :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z} = \quad (6)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right),$$

Розглянемо апроксимацію похідних, що входять в рівняння масопереносу (6). Конвективні похідні представимо у вигляді [1] :

$$\frac{\partial uC}{\partial x} = \frac{\partial u^+ C}{\partial x} + \frac{\partial u^- C}{\partial x},$$

$$\frac{\partial vC}{\partial y} = \frac{\partial v^+ C}{\partial y} + \frac{\partial v^- C}{\partial y},$$

$$\frac{\partial wC}{\partial z} = \frac{\partial w^+ C}{\partial z} + \frac{\partial w^- C}{\partial z},$$

де $u^+ = \frac{u + |u|}{2}; u^- = \frac{u - |u|}{2}; v^+ = \frac{v + |v|}{2};$
 $v^- = \frac{v - |v|}{2}; w^+ = \frac{w + |w|}{2}; w^- = \frac{w - |w|}{2}.$

Для апроксимації конвективних похідних використовуємо вирази [1] :

$$\frac{\partial u^+ C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j,k}^+ C_{i,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^+ C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial u^- C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j,k}^- C_{i+1,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^- C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^- C^{n+1},$$

$$\frac{\partial v^+ C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1,k}^+ C_{i,j,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^+ C_{i,j-1,k}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial v^- C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1,k}^- C_{i,j+1,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^- C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^- C^{n+1},$$

$$\frac{\partial w^+ C}{\partial z} \approx \frac{w_{i,j,k+1}^+ C_{i,j,k}^{n+1} - w_{i,j,k}^+ C_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta z} = L_z^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial w^- C}{\partial z} \approx \frac{w_{i,j,k+1}^- C_{i,j,k+1}^{n+1} - w_{i,j,k}^- C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta z} = L_z^- C^{n+1},$$

де $L_x^+ = \frac{u_{i+1,j,k}^+ C_{ijk}^{n+1} - u_{ijk}^+ C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x},$

$L_x^- = \frac{u_{i+1,j,k}^- C_{i+1,j,k}^{n+1} - u_{ijk}^- C_{ijk}^{n+1}}{\Delta x},$ $L_y^+, L_y^-, L_z^+, L_z^-$ –

позначення різницевої операторів при апроксимації конвективних похідних.

Другі похідні апроксимуємо наступними виразами [1] :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \approx \mu_x \frac{C_{i+1,j,k}^{n+1} - C_{ijk}^{n+1}}{\Delta x^2} - \mu_x \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x^2} =$$

$$= M_{xx}^- C^{n+1} + M_{xx}^+ C^{n+1},$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) &\approx \mu_y \frac{C_{i,j+1,k}^{n+1} - C_{ijk}^{n+1}}{\Delta y^2} - \mu_y \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j-1,k}^{n+1}}{\Delta y^2} = \\ &= M_{yy}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1}, \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) &\approx \mu_z \frac{C_{i,j,k+1}^{n+1} - C_{ijk}^{n+1}}{\Delta z^2} - \mu_z \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta z^2} = \\ &= M_{zz}^- C^{n+1} + M_{zz}^+ C^{n+1}. \end{aligned}$$

В даних виразах:

$$M_{xx}^+ = -\mu_x \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x^2}, M_{xx}^- = \mu_x \frac{C_{i+1,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x^2},$$

M_{yy}^+ , M_{yy}^- , M_{zz}^+ , M_{zz}^- – позначення різницевих операторів при апроксимації других похідних.

З урахуванням цих позначень, різницевий аналог тривимірного рівняння переносу домішки матиме вигляд:

$$\begin{aligned} &\frac{C_{ijk}^{n+1} - C_{ijk}^n}{\Delta t} + L_x^+ C^{n+1} + L_x^- C^{n+1} + L_y^+ C^{n+1} + \\ &+ L_y^- C^{n+1} + L_z^+ C^{n+1} + L_z^- C^{n+1} + \sigma C_{ijk}^{n+1} = \\ &= \left(M_{xx}^+ C^{n+1} + M_{xx}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1} + M_{yy}^- C^{n+1} + \right. \\ &\quad \left. + M_{zz}^+ C^{n+1} + M_{zz}^- C^{n+1} \right). \end{aligned}$$

Похідна за часом представляється так:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{ij}^n}{\Delta t}.$$

При інтегруванні на часовому інтервалі dt виконаємо розщеплення даного рівняння наступним чином :

– на першому часовому кроці $k = n + \frac{1}{4}$:

$$\begin{aligned} &\frac{C_{i,j,k}^k - C_{i,j,k}^n}{\Delta t} + \\ &+ \frac{1}{2} \left(L_x^+ C^k + L_y^+ C^k + L_z^+ C^k \right) + \frac{\sigma}{4} C_{i,j,k}^k = \quad (7) \\ &= \frac{1}{4} \left(M_{xx}^+ C^k + M_{xx}^- C^n + M_{yy}^+ C^k + \right. \\ &\quad \left. + M_{yy}^- C^n + M_{zz}^+ C^k + M_{zz}^- C^n \right), \end{aligned}$$

– на другому часовому кроці $k = n + \frac{1}{2}$;

$c = n + \frac{1}{4}$:

$$\begin{aligned} &\frac{C_{i,j,k}^k - C_{i,j,k}^c}{\Delta t} + \\ &+ \frac{1}{2} \left(L_x^- C^k + L_y^- C^k + L_z^- C^k \right) + \frac{\sigma}{4} C_{i,j,k}^k = \quad (8) \\ &= \frac{1}{4} \left(M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^k + \right. \\ &\quad \left. + M_{yy}^+ C^c + M_{zz}^- C^k + M_{zz}^+ C^c \right), \end{aligned}$$

– на третьому часовому кроці $k = n + \frac{3}{4}$; $c = n + \frac{1}{2}$ використовується формула

(8),

– на четвертому часовому кроці $k = n + 1$; $c = n + \frac{3}{4}$ використовується формула

(7).

Переваги розглянутої математичної моделі :

1. можливість здійснювати просторове дослідження процесу біологічного очищення стічних вод в реакторі;
2. можливість аналізувати процес очищення для різних моментів часу.

Недоліки :

1. неможливість аналізувати ефективність очищення стічних вод для рухомого біоценозу;
2. неможливість моделювання турбулентної течії;
3. розглянута різницева схема має перший порядок точності.

Математична модель масопереносу у відстійнику

Для аналізу ефективності роботи горизонтальних або вертикальних відстійників використовується наступна 3D модель масопереносу :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial uS}{\partial x} + \frac{\partial vS}{\partial y} + \frac{\partial (w - w_g)S}{\partial z} = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial S}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial S}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial S}{\partial z} \right), \end{aligned}$$

де S – концентрація домішки у відстійнику; w_g – швидкість гравітаційного осадження домішки в споруді.

Постановка краєвих умов для даного моделюючого рівняння наведена в [1].

Дане рівняння масопереносу

розщеплюється на систему одновимірних рівнянь наступним чином :

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial uS}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial S}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial vS}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial S}{\partial y} \right), \\ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial wS}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial S}{\partial z} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Кожне рівняння з даної системи описують процес переносу субстрату в напрямках «X» та «Y», «Z». Різницеві рівняння, що дають можливість розв'язати систему рівнянь (9), такі :

– крок № 1 для першого рівняння:

$$\begin{aligned} S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} &= S_{i,j,k}^n - Vt \frac{u_{i+1,j,k}^+ S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - u_{i,j,k}^+ S_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{Vx} + \\ &+ Vt \mu \frac{-S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{Vx^2} + Vt \mu \frac{-S_{i,j,k}^n + S_{i+1,j,k}^n}{Vx^2}; \end{aligned} \quad (10)$$

– крок № 2 для першого рівняння:

$$\begin{aligned} S_{i,j,k}^{n+1} &= S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - Vt \frac{u_{i+1,j,k}^- S_{i+1,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^- S_{i,j,k}^{n+1}}{Vx} + \\ &+ Vt \mu \frac{-S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{Vx^2} + Vt \mu \frac{-S_{i,j,k}^{n+1} + S_{i+1,j,k}^{n+1}}{Vx^2}, \end{aligned} \quad (11)$$

де $u^+ = \frac{u + |u|}{2}$, $u^- = \frac{u - |u|}{2}$;

– крок № 1 для другого рівняння:

$$\begin{aligned} S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} &= S_{i,j,k}^n - Vt \frac{v_{i,j+1,k}^+ S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - v_{i,j,k}^+ S_{i,j-1,k}^{n+\frac{1}{2}}}{Vy} + \\ &+ Vt \mu \frac{-S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{Vy^2} + Vt \mu \frac{-S_{i,j,k}^n + S_{i+1,j,k}^n}{Vy^2}; \end{aligned} \quad (12)$$

– крок № 2 для другого рівняння:

$$\begin{aligned} S_{i,j,k}^{n+1} &= S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - Vt \frac{v_{i,j+1,k}^- S_{i,j,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^- S_{i,j-1,k}^{n+1}}{Vy} + \\ &+ Vt \mu \frac{-S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{Vy^2} + Vt \mu \frac{-S_{i,j,k}^{n+1} + S_{i+1,j,k}^{n+1}}{Vy^2}, \end{aligned} \quad (13)$$

де $v^+ = \frac{v + |v|}{2}$, $v^- = \frac{v - |v|}{2}$.

– крок № 1 для третього рівняння:

$$\begin{aligned} S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} &= S_{i,j,k}^n - Vt \frac{w_{i,j,k+1}^+ S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - w_{i,j,k}^+ S_{i,j,k-1}^{n+\frac{1}{2}}}{Vz} + \\ &+ Vt \mu \frac{-S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i,j,k-1}^{n+\frac{1}{2}}}{Vz^2} + Vt \mu \frac{-S_{i,j,k}^n + S_{i,j,k+1}^n}{Vz^2}; \end{aligned} \quad (14)$$

– крок № 2 для третього рівняння:

$$\begin{aligned} S_{i,j,k}^{n+1} &= S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - Vt \frac{w_{i,j,k+1}^- S_{i,j,k+1}^{n+1} - w_{i,j,k}^- S_{i,j,k}^{n+1}}{Vz} + \\ &+ Vt \mu \frac{-S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i,j,k-1}^{n+\frac{1}{2}}}{Vz^2} + Vt \mu \frac{-S_{i,j,k}^{n+1} + S_{i,j,k+1}^{n+1}}{Vz^2}, \end{aligned} \quad (15)$$

де $w^- = \frac{w - |w|}{2}$, $w^+ = \frac{w + |w|}{2}$.

Перевагами розглянутої математичної моделі є :

1. можливість здійснювати 3D дослідження процесу очищення стічних вод у відстійниках з урахуванням конвективно-дифузійного переносу домішки;

2. можливість динаміки осадження домішки у відстійниках для різних моментів часу.

Недоліки :

1. неможливість моделювання турбулентної течії;

2. розглянута різницева схема має перший порядок точності.

Для практичної реалізації розглянутих чисельних моделей потрібно визначити поле швидкості води в споруді, тобто вирішити задачу гідродинаміки.

Модель гідродинаміки. Для визначення поля швидкості потоку в спорудах використовується рівняння Лапласа для потенціалу швидкості :

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = 0. \quad (16)$$

Компоненти вектора швидкості визначаються так :

$$u = \frac{\partial P}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial P}{\partial y}, \quad w = \frac{\partial P}{\partial z}. \quad (17)$$

Граничні умови для рівняння Лапласу розглянуті в [1].

Для чисельного розв'язання задачі

гідродинаміки використовуються дві кінцево-різницевої схеми. Перша схема – це позмінно-трикутний метод А. А. Самарського. Для використання даного методу рівняння Лапласу приводиться до вигляду :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2}. \quad (18)$$

Для чисельного інтегрування даного рівняння з еволюційною похідною використовується схема :

$$\frac{P_{i,j,k}^{n+1/2} - P_{i,j,k}^n}{0,5\Delta\eta} = \frac{P_{i+1,j,k}^n - P_{i,j,k}^n}{\Delta x^2} + \frac{-P_{i,j,k}^{n+1/2} + P_{i-1,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x^2} + \frac{P_{i,j+1,k}^n - P_{i,j,k}^n}{\Delta y^2} + \frac{-P_{i,j,k}^{n+1/2} + P_{i,j-1,k}^{n+1/2}}{\Delta y^2} + \frac{P_{i,j,k+1}^n - P_{i,j,k}^n}{\Delta z^2} + \frac{-P_{i,j,k}^{n+1/2} + P_{i,j,k-1}^{n+1/2}}{\Delta z^2},$$

$$\frac{P_{i,j,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+1/2}}{0,5\Delta\eta} = \frac{P_{i+1,j,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{-P_{i,j,k}^{n+1/2} + P_{i-1,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x^2} + \frac{P_{i,j+1,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta y^2} + \frac{-P_{i,j,k}^{n+1/2} + P_{i,j-1,k}^{n+1/2}}{\Delta y^2} + \frac{P_{i,j,k+1}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta z^2} + \frac{-P_{i,j,k}^{n+1/2} + P_{i,j,k-1}^{n+1/2}}{\Delta z^2}.$$

На кожному дробовому кроці невідоме значення P визначається за явною схемою рахунку, що біжить, що робить розрахунок економічним і зручним для програмування.

Друга схема – це локально одновимірна схема розв'язання рівняння Лапласу для потенціалу швидкості. На першому кроці здійснюються наступні перетворення. Знову, представимо це рівняння у вигляді :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2}, \quad (19)$$

де t – фіктивний час.

Далі, рівняння (19) розщеплено так :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}. \quad (20)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} \quad (21)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} \quad (22)$$

Розрахункові залежності (метод

Річардсона) для визначення невідомого значення P на базі рівняння (20) мають вигляд :

$$P_{i,j,k}^{n+1} = P_{i,j,k}^n + \sqrt{t} \frac{P_{i+1,j,k}^n - P_{i,j,k}^n}{\Delta x^2} + \sqrt{t} \frac{-P_{i,j,k}^n + P_{i-1,j,k}^n}{\Delta x^2}. \quad (23)$$

Розрахункові залежності для визначення невідомого значення P на базі рівняння (21) мають вигляд :

$$P_{i,j,k}^{n+1} = P_{i,j,k}^n + \sqrt{t} \frac{P_{i,j+1,k}^n - P_{i,j,k}^n}{\Delta y^2} + \sqrt{t} \frac{-P_{i,j,k}^n + P_{i,j-1,k}^n}{\Delta y^2}. \quad (24)$$

Розрахункові залежності для визначення невідомого значення P на базі рівняння (22) мають вигляд :

$$P_{i,j,k}^{n+1} = P_{i,j,k}^n + \sqrt{t} \frac{P_{i,j,k+1}^n - P_{i,j,k}^n}{\Delta z^2} + \sqrt{t} \frac{-P_{i,j,k}^n + P_{i,j,k-1}^n}{\Delta z^2}. \quad (25)$$

Розрахунок за даними залежностями закінчується коли виконується умова :

$$\left| P_{i,j,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^n \right| \leq \varepsilon, \quad (26)$$

де ε – мале число; n – номер ітерації.

На наступному етапі визначається швидкість течії :

$$u = \frac{P_{i+1,j,k} - P_{i,j,k}}{\Delta x}, \quad v = \frac{P_{i,j+1,k} - P_{i,j,k}}{\Delta y},$$

$$w = \frac{P_{i,j,k+1} - P_{i,j,k}}{\Delta z}.$$

Для кодування різницевих рівнянь використовувався FORTRAN.

Перевагами розглянутих математичних моделей є :

1. можливість визначати 3D поле швидкості потоку в спорудах;
2. можливість вирішувати задачу гідродинаміки за декілька секунд.

Недоліки :

1. неможливість моделювання турбулентної течії;

2. неможливість визначати відривні зони.

Результати. Нижче наведені результати рішення двох модельних задач на базі розроблених чисельних моделей. Перша задача – визначення поле концентрації кисню в аеротенку при розташуванні в споруді. Розрахунок здійснювався при таких параметрах: розрахунки виконувалися при наступних вхідних даних: $S_{in} = 130$ мг/л – концентрація субстрату (БПКпов), що потрапляє в споруду; розміри біореактору $1*0,5*0,3$ (в безрозмірному вигляді); $Q_S(t) = 1100$ м³/доб. – витрата стічних вод; $\mu_x = \mu_y = 2*10^{-4}$ м²/доб.; $X_{in} = 210$ мг/л – концентрація активного мулу, що потрапляє в реактор; $\mu_{max} = 1,04$ – параметр; $K_s = 100$ мг/л – параметр; $K_d = 0,055$ 1/доб. – коефіцієнт, що враховує загибель мікроорганізмів; $Y = 0,55$ – параметр; початкові умови: $S_0 = 140$ мг/л, $X_0 = 205$ мг/л – концентрація субстрату та активного мулу в реакторі для моменту часу $t = 0$, інтенсивність подачі кисню від кожного аератору 1 (в безрозмірному вигляді). В аеротенку розташовано 6 аераторів, схема їх розташування показана на рисунку 1.

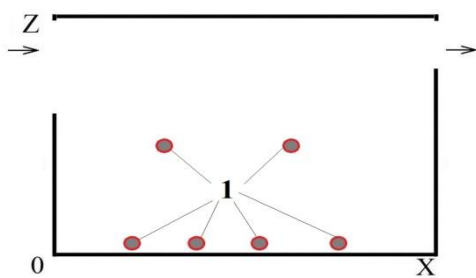


Рис. 1. Розрахункова схема біореактору: 1 – аератори

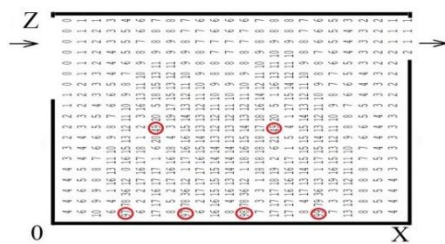


Рис. 2. Поле концентрації розчинного кисню в біореакторі

На рисунку 2 показано поле безрозмірне значення концентрації кисню в перерізі $y = 0,25$. Кожне число на рисунку 2 показує безрозмірне значення концентрації кисню у відсотках від максимальної концентрації в даному перерізі.

Як можна бачити з рисунку 2 розроблена чисельна модель дозволяє визначити «радіус впливу» кожного аератору та визначити область, де має місце суперпозиція полів концентрації кисню при близькому розташуванні аераторів. Таким чином, використовуючи розроблену чисельну модель можна визначити раціональне розташування аераторів у споруді, щоб забезпечити потрібну концентрацію кисню в біореакторі. Час розрахунку даного класу задач – 4 с.

На рисунку 3 показана розрахункова схема в задачі при моделюванні процесу осадження домішки у відстійнику з додатковим елементом – екраном. Як можна бачити з рисунку 3 екран має складну геометричну форму. Розміри розрахункової області $1*0,5*0,3$ (в безрозмірному вигляді), швидкість осадження домішки $0,001$ мм/с. Швидкість води на вході у відстійник $0,01$ м/с.

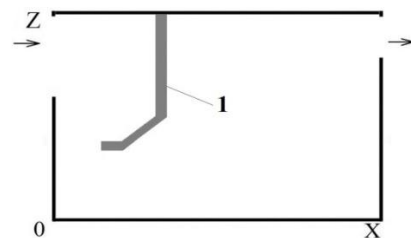


Рис. 3. Розрахункова схема відстійника: 1 – екран

На рисунку 4 показано поле безрозмірної концентрації домішки у відстійнику в перерізі $y = 0,25$. Як і вище, це концентрація у відсотках від максимальної концентрації в даному перерізі.

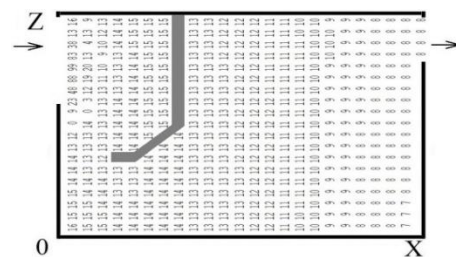


Рис. 4. Безрозмірне значення концентрації вагової домішки у відстійнику

З рисунку 4 можна бачити, що використання екрану дає можливість забезпечити ефективне осадження домішки у споруді. Так, якщо максимальна концентрація домішки має місце на вході у споруду 99 %, то вже за екраном, ця концентрація дорівнює 13 %.

Відзначимо, що час розрахунку кожного сценарію був 4 с.

Наукова новизна та практична цінність. В статті розглянуті чисельні моделі для визначення концентрації кисню, активного мулу, субстрату в біореакторі.

Запропоновані чисельні моделі для аналізу ефективності процесу очищення стічних вод у відстійниках.

Побудовані чисельні моделі визначення поля швидкості потоку стічних вод в

біореакторах та відстійниках.

Запропоновані математичні моделі можуть бути використані для оцінювання ефективності роботи споруд водовідведення.

Висновки

1. У статті розглянуті багатофакторні математичні моделі біологічного очищення стічних вод в аеротенках та осадження домішки у відстійниках.

2. Запропоновані чисельні моделі для визначення поля швидкості в аеротенках та відстійниках, що дозволяють швидко, в режимі «on-line», вирішити задачу гідродинаміки.

3. Розглянуті переваги та недоліки побудованих математичних моделей.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Біляєв М. М., Козачина В. А., Гунько О. Ю., Лемеш М. В. Комп'ютерне моделювання процесів біологічної очистки стічних вод. Дніпро : Журфонд, 2023. 186 с.
2. Василенко О. А., Грабовський П. О., Ларкіна Г. М., Поліщук О. В., Прогульний В. Й. Реконструкція і інтенсифікація споруд водопостачання та водовідведення : навч. посіб. Київ : ІВНВП «Укрґеліотек», 2010. 272 с.
3. Карелин Я. А., Жуков Д. Д., Журов В. Н., Репин Б. Н. Очистка производственных сточных вод в аеротенках. Москва : Стройиздат, 1973. 223 с.
4. Ласков Ю. М., Воронов Ю. В., Калицун В. И. Примеры расчетов канализационных сооружений. Москва : Высшая школа, 1981. 237 с.
5. Олійник О. Я., Айрапетян Т. С. Моделювання очисних стічних вод від органічних забруднень в біореакторах-аеротенках зі зваженим (вільно плаваючим) і закріпленим біоценозом. *Доповідь НАН України*. 2015. № 5. С. 55–60.
6. Alharbi A. O. M. The biological treatment of wastewater : mathematical models. *Bulletin of the Australian Mathematical Society*. 2016. Vol. 94, iss. 2. Pp. 347–348. DOI: <https://doi.org/10.1017/S0004972716000411>.
7. Babaei A., Azadi R., Jaafarzadeh N., Alavi N. Application and Kinetic Evaluation of upflow Anaerobic bio-film Reactor for Nitrogen Removal from Wastewater. *Iranian Journal of Environmental Health Science and Engineering*. 2013. Vol. 10, iss. 1. Pp. 1–8. URL: <https://doi.org/10.1186/1735-2746-10-20>.
8. Dapelo D., Bridgeman G. A CFD strategy to retrofit an anaerobic digester to improve mixing performance in wastewater treatment. *Water Science & Technology*. 2020. Vol. 81, iss. 8. Pp. 1646–1657. URL: <https://doi.org/10.2166/wst.2020.086>.
9. Gao H., Stenstrom M. K. Development and applications in CFD modeling for secondary settling tanks over the last three decades. *A review. Water Environment Research*. 2019. Vol. 92, iss. 6. Pp. 796–820. DOI: <https://doi.org/10.1002/wer.1279>.
10. Gao H., Stenstrom M. K. Influence of Model Parameters and Inlet Turbulence Boundary Specification Methods in Secondary Settling Tanks : Computational Fluid Dynamics Study. *Journal of Environmental Engineering*. 2020. Vol. 146, iss. 5. Pp. 04020028-1–04020028-12. URL: [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)EE.1943-7870.0001689](https://doi.org/10.1061/(ASCE)EE.1943-7870.0001689).
11. Mocanu C. R., Mihaillescu R. Numerical Simulation Wastewater Treatment Aeration Processes. *U. P. B. Sci. Bull., Series D*. 2012. Vol. 74, iss. 2. Pp. 191–198.
12. Pereda M., Zamarreno J. M. Agent – based modeling of an activated sludge process in batch reactor. *19th Mediterranean Conference on Control and Automation Aquis*. 2011. Pp. 1128–1133. URL: <https://doi.org/10.1109/med.2011.5983027>.
13. Vilanova R., Rojas J. D., Alfaro V. M. Digital Control of a Waste Water Treatment Plant. *Int. J. of Computers, Communications & Control*. 2011. Vol. VI, no. 2 (June). Pp. 367–374.

REFERENCES

1. Biliaiev M.M., Kozachyna V.A., Gunko O.Yu. and Lemesh M.V. *Kompyuterne modelyuvannya pro-cesiv biologichnoyi ochystky stichnyx vod : monografiya* [Computer modeling of biological wastewater treatment processes : monograph]. Dnipro : Zhurfond Publ., 2023, 186 p. (in Ukrainian).
2. Vasylenko O.A., Hrabovskiy P.O., Larkina H.M., Polishchuk O.V. and Prohulnyi V.Y. *Rekonstruktsiia i intensyfikatsiia sporud vodopostachannia ta vodovidvedennia: navchalnyi posibnyk* [Reconstruction and intensification of water supply and drainage facilities]. Kyiv : IVNVKP "Ukrheliotek" Publ., 2010, 272 p. (in Ukrainian).
3. Karelin Ya.A., Zhukov D.D., Zhurov V.N. and Repin B.N. *Ochistka proizvodstvennykh stichnykh vod v aerotenkakh* [Treatment of industrial wastewater in aerotanks]. Moscow : Stroizdat Publ., 1973, 223 p. (in Russian).
4. Laskov Yu.M., Voronov Yu.V. and Kalicun V.I. *Primery raschetov kanalizacionnykh sooruzhenij* [Examples of calculations of sewer structures]. Moscow : Vysshaya Shkola Publ., 1981, 237 p. (in Russian).
5. Olynyk O.Ya. and Airapetyan T.S. *Modelyuvannya ochysnykh stichnykh vod vid orhanichnykh zabrudnen' v bioreaktorakh-aerotenkakh zi zvezhenym (vil'no plavayuchym) i zakriplenyim biotsenozom. Dopovid' NAN Ukrayiny* [The modeling of the clearance of waste waters from organic pollutions in bioreactors-aerotanks with suspended (free flow) and fixed biocenoses. Reports of the National Academy of Sciences of Ukraine]. 2015, no. 5, pp. 55–60. (in Ukrainian).
6. Alharbi A.O.M. The biological treatment of wastewater: mathematical models. Bulletin of the Australian Mathematical Society. 2016, no. 94 (2), pp. 347–348. URL: <https://doi.org/10.1017/s0004972716000411>.
7. Babaei A., Azadi R., Jaafarzadeh N. and Alavi N. Application and Kinetic Evaluation of upflow Anaerobic biofilm Reactor for Nitrogen Removal from Wastewater. Iranian Journal of Environmental Health Science and Engineering. 2013, no. 10 (1), pp. 1–8. URL: <https://doi.org/10.1186/1735-2746-10-20>.
8. Dapelo D. and Bridgeman G. A CFD strategy to retrofit an anaerobic digester to improve mixing performance in wastewater treatment. Water Science & Technology. 2020, no. 81 (8), pp. 1646–1657. URL: <https://doi.org/10.2166/wst.2020.086>.
9. Gao H. and Stenstrom M.K. Development and applications in CFD modeling for secondary settling tanks over the last three decades : a review. Water Environment Research. 2019, no. 92 (6), pp. 796–820. URL: <https://doi.org/10.1002/wer.1279>.
10. Gao H. and Stenstrom M.K. Influence of Model Parameters and Inlet Turbulence Boundary Specification Methods in Secondary Settling Tanks : Computational Fluid Dynamics Study. Journal of Environmental Engineering. 2020, no. 146 (5), pp. 04020028-1-04020028-12. URL: [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)EE.1943-7870.0001689](https://doi.org/10.1061/(ASCE)EE.1943-7870.0001689).
11. Mocanu C.R. and Mihailescu R. Numerical Simulation Wastewater Treatment Aeration Processes. U. P. B. Sci. Bull., Series D. 2012, no. 74 (2), pp. 191–198.
12. Pereda M. and Zamarrero J.M. Agent-based modeling of an activated sludge process in batch reactor. 19th Mediterranean Conference on Control and Automation Aquis. 2011, pp. 1128–1133. URL: <https://doi.org/10.1109/med.2011.5983027>.
13. Vilanova R., Rojas J.D. and Alfaro V.M. Digital Control of a Waste Water Treatment Plant. Int. J. of Computers, Communications & Control. 2011, vol. VI, no. 2 (June), pp. 367–374. doi: 10.15837/ijccc.2011.2.2184.

Надійшла до редакції: 01.11.2024.