МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

ДНІПРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ЗАЛІЗНИЧНОГО ТРАНСПОРТУ ІМЕНІ АКАДЕМІКА В. ЛАЗАРЯНА

Кваліфікаційна наукова праця
на правах рукопису

ЛЕМЕШ МАКСИМ ВІКТОРОВИЧ

УДК 519.6:628.32(043.5)

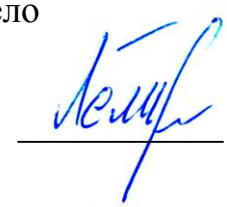
ДИСЕРТАЦІЯ

УДОСКОНАЛЕННЯ МЕТОДІВ РОЗРАХУНКУ СПОРУД БІОЛОГІЧНОЇ ОЧИСТКИ

Спеціальність 192 – Будівництво та цивільна інженерія

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

Дисертаційна робота містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело



М. В. Лемеш

Науковий керівник: Біляєв Микола Миколайович**,** доктор технічних наук, професор

Дніпро – 2020

АНОТАЦІЯ

Лемеш Максим Вікторович «Удосконалення методів розрахунку споруд біологічної очистки» – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 192 – Будівництво та цивільна інженерія. – Дніпровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна – Дніпровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна, Дніпро, 2020.

Дисертація присвячена розробці методів оцінки ефективності очистки води в біореакторах – аеротенках. Біологічна очистка стічних вод широко використовується в усіх країнах світу, тому що являє собою ефективний засіб ліквідації органічних забруднень. На етапі проектування споруд біологічної очистки, реконструкції існуючих біореакторів виникає потреба швидко оцінити ефективність роботи споруд для нових умов експлуатації. З часом конструкції біореакторів, режими їх роботи суттєво ускладнюються. Дуже часто умови експлуатації сучасних біореакторів відрізняються від «типових», коли для розрахунку біореакторів достатньо використання існуючих інженерних методів розрахунку. Інженерні методи не враховують ряд важливих параметрів, що впливають на процес біологічного очищення стічних вод, а саме: форму біореактора, присутність рухомих носіїв біоценозу, наявність додаткових конструктивних елементів в споруді, тощо. Тому інженерні методи не відповідають, в ряді випадків, сучасним вимогам. У зв’язку з цим розробка сучасних методів комп’ютерного моделювання багатофакторного процесу очистки стічних вод в біологічних реакторах з метою визначення ефективності їх роботи є важливою науковою задачею.

Наукова новизна отриманих результатів**:**

вперше:

- розроблено метод оцінки ефективності роботи біологічного реактора для очистки стічних вод, що базується на використанні двовимірних моделей

гідродинаміки, масопереносу та біологічної очистки, який дозволяє швидко розрахувати ефективність очистки води в споруді з урахуванням її конструктивних особливостей, режиму роботи;

- розроблено метод оцінки ефективності роботи біологічного реактора для очистки стічних вод, що базується на використанні тривимірних моделей гідродинаміки, масопереносу та біологічної очистки, який дозволяє швидко розрахувати ефективність очистки води в споруді з урахуванням її конструктивних особливостей, режиму роботи;

- розроблено метод оцінки ефективності роботи біологічного реактора для очистки стічних вод, що базується на використанні двовимірних моделей гідродинаміки, масопереносу та біологічної очистки, який дозволяє швидко розрахувати ефективність очистки води в споруді з рухомим біоценозом;

удосконалено:

- метод розрахунку біореактора для очистки стічних вод, що базується на використанні нуль–вимірних моделей біологічної очистки стічних вод, який дозволяє, на відміну від існуючих, враховувати зміну з часом витрати та концентрації активного мулу, субстрату, що надходять в біореактор.

Практичне значення отриманих результатів**.** Розроблені в дисертації методи дозволяють швидко оцінювати ефективність роботи як класичних біореакторів, так і реакторів з додатковими конструктивними елементами, а також реакторів з рухомим біоценозом. Час розрахунку ефективності роботи біологічного реактору за допомогою розроблених методів складає декілька секунд, що є дуже важливим для їх практичного використання при проведенні проектувальних робіт. Розроблені методи розрахунку будуть корисними для оптимізації роботи існуючих біологічних реакторів при змінних режимах роботи.

Результати дисертаційної роботи впроваджені на ТОВ «Енергосервіс-КР»**,** а також використовуються в навчальному процесі Дніпровського національного університету залізничного транспорту імені академіка

В. Лазаряна при підготовці студентів, які навчаються за освітньою програмою «Водопостачання та водовідведення».

Системний аналіз наукових публікацій показав, що в світі найбільш активно використовуються нуль-вимірні математичні моделі для розрахунку реакторів біологічної очистки стічних вод. Але ці моделі не враховують зміну з часом витрати стічних вод, а також зміну з часом концентрації субстрату, що надходить в реактор. Аналіз літературних джерел також показав, що існує дефіцит методів розрахунку біореакторів для очистки стічних вод, що дозволяють розраховувати гідродинаміку та багатовимірні процеси масопереносу в біореакторі. Розрахунок на базі існуючих моделей, що реалізовані в комерційних кодах, триває кілько діб. В Україні відсутні моделі розрахунку біоректорів, що дозволяли б враховувати їх геометричну форму та формування нерівномірного поля концентрації активного мулу та субстрату в реакторі. Тому актуальною задачею є створення математичних моделей для розрахунку біореакторів з завислим або рухомим біоценозом.

Для експрес розрахунку біореакторів очистки стічних вод запропоновано дві балансові моделі, що дають можливість розраховувати процес біологічного очищення стічних вод з урахуванням зміни з часом витрати стічних вод, що потрапляють в реактор, та вхідної концентрації субстрату, а також з урахуванням зміни з часом витрати активного мулу, що потрапляє в реактор та його концентрації.

З метою врахування впливу гідродинаміки потоку стічних вод в реакторі, а також масопереносу субстрату на ефективність роботи біореактора розроблена двовимірна чисельна модель. Для розрахунку процесу окиснення субстрату в даній моделі використовується рівняння першого порядку. Ця модель може бути використана для проведення «пілотних» розрахунків реактору з метою визначення його ефективності. Для моделювання роботи біологічного реактора з урахуванням гідродинаміки потоку стічних вод в реакторі, а також масопереносу субстрату та активного мулу побудована інша чисельна модель, в якій розрахунок процесу

біологічного очищення стічних вод здійснюється на базі рівнянь Monod. Крім вказаної моделі також розроблена тривимірна математична модель роботи біологічного реактору, що базується на рівняннях Monod, рівняннях масопереносу для субстрату та активного мулу. Модель дає можливість розраховувати роботу біологічного реактора з урахування нерівномірного поля течії в споруді.

В дисертації також розроблена динамічна чисельна модель для розрахунку процесу біологічної очистки води в реакторах з рухомим біоценозом.

В дисертації наведено опис побудованих чисельних моделей. Основу розроблених чисельних моделей складають кінцево–різницеві схеми. Для чисельного інтегрування двовимірних та тривимірних рівнянь гідродинаміки (рівняння Лапласа для потенціалу швидкості) використовуються різницеві схеми розщеплення. На кожному кроці розщеплення розрахунок невідомої величини потенціалу швидкості здійснюється за явною формулою. Це дозволяє побудувати просту програмну реалізацію чисельної моделі. Основу побудованих чисельних моделей для розрахунку полів концентрації субстрату, активного мулу в біореакторі, а також концентрації рухомих носіїв біоценозу складають різницеві схеми розщеплення. Особливістю цих різницевих схем є те, що визначення невідомого значення концентрації субстрату, активного мулу, концентрації рухомих носіїв біоценозу реалізується за явною схемою. В дисертації наводиться опис розроблених пакетів програм, що реалізують комп’ютерний розрахунок на базі розроблених чисельних моделей. Виконано верифікацію побудованих чисельних моделей.

Для ілюстрації можливостей та робочого діапазону побудованих чисельних моделей в дисертації представлено рішення комплексу прикладних задач. Усі задачі відносяться до одного з найскладніших класів – нестаціонарних задач біологічної очистки стічних вод. Розглянуті в дисертації задачі умовно можна поділити на чотири групи. Перша група

задач – це визначення ефективності роботи біореакторів для очистки стічних вод на базі побудованих камерних чисельних моделей. При проведені обчислювальних експериментів визначається динаміка процесу біологічної очистки стічних вод при різних режимах експлуатації очисних споруд. Друга група задач – це дослідження ефективності роботи біореакторів на базі розроблених двовимірних чисельних моделей. Розглядаються задачі, в яких визначається ефективність роботи реакторів при наявності в них додаткових елементів, а також додаткового, дотичного вприскування активного мулу в робочий об'єм реактору. Третя група задач – це дослідження ефективності роботи біореакторів, в яких використовуються рухомі носії біоценозу. Дослідження проведено для біореакторів з різними варіантами розташування блоків з рухомими носіями біоценозу всередині споруди. Четверта група задач – це дослідження ефективності роботи біореакторів на базі розроблених тривимірних чисельних моделей. Дослідження проведено для біореакторів з різними варіантами розташування додаткових пластин в споруді. Результати проведених досліджень показують, що розроблені методи розрахунку біореакторів дозволяють на новому якісному та кількісному рівні проводити розрахунки реакторів для біологічної очистки стічних вод.

Ключові слова: очищення води, водокористування, біологічний реактор, чисельне моделювання, модель Monod, рухомі носії біоценозу.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації

Статті в наукових фахових виданнях України

1. Biliaiev M., Lemesh M. Modeling of Biological Wastewater Treatment on the Basis of Quick-Computing Numerical Model. *Наука та прогрес транспорту*. –

2018. – № 1 (73). – С. 15–23. *(Видання включено до міжнародної наукометричної бази Index Copernicus)*

2. Biliaiev M., Gunko E., Lemesh M. Simulation of Aeration Tank Work. *Collection of Research Papers of National Mining University*.- 2018. - № 53. – С. 230-237.

3. Biliaiev M.M., Kirichenko P.S., Lemesh M.V.Numerical simulation of biological wastewater treatment in aeration tank. *Математичне моделювання*. – 2018. – №1. - С. 28-34.

4. Biliaiev M., Mashykhina P., Lemesh M. Simplified model to simulate the aeration tank work. *Collection of Research Papers of National Mining University*. – 2018. - № 54. - С. 330-336.

5.Biliaiev M., Savina O., Lemesh M.,Tsurkan V. Biological waste water treatment in aeration tanks //*Collection of Research Papers of National Mining University*. – 2018. - № 55. - P. 325-333.

Стаття у закордонному науковому періодичному виданні:

6. Біляєв М.М., Козачина В.А., Лемеш М.В., Кіріченко П.С.Моделювання очистки води в системах «аеротенк - відстійник».*East European Scientific Journal*. – 2019. – Vol 10(50). – P. 10-15.

Публікації у виданнях, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

7.Беляев Н.Н., Козачина В.А., Лемеш М.В. Информационная система «WASTE-WATERTREATMENT» для оценки эффективности работы очистных сооружений. XI Міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні та комунікаційні технології на транспорті, в промисловості та освіті», 13.12.2017 -14.12.2017, Дніпро, 2017.

8. Беляев Н.Н., Козачина В.А., Лемеш М.В., Стуликов З.Г. Математическое моделирование биологической очистки сточных вод в аэротенках. *Материалы международной научно-технической конференции*

«Информационные технологии в металлургии и машиностроению», 27-29 березня, 2018. Дніпро, 2018.

9. Беляев Н.Н., Козачина В.А., Лемеш М.В., Грабар Я.А. Математические модели в задачах очистки сточных вод. *IV Міжнародна науково-технічна конференція «Комп'ютерне моделювання та оптимізація систем»,* 1-2 листопада 2018р. – Дніпро, УДХТУ – С. 37.

10. Беляев Н.Н., Козачина В.А., Лемеш М.В. Информационная система для анализа работы аэротенков. *XII Міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні і комунікаційні технології на транспорті, в промисловості та освіті»,* 12-13 грудня, 2018р. – Дніпро, ДНУЗТ – С. 128.

11. Беляев Н.Н., Долина Л.Ф., Козачина В.А., Лемеш М.В. Численные модели для расчета гидродинамики и массопереноса в системах очистки води. *XIII Міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні і комунікаційні технології на транспорті, в промисловості та освіті»,* 11-12 грудня, 2019р. – Дніпро, ДНУЗТ – С. 53.

12. Лемеш М.В., Козачина В.А., Гончаров В.В., Поляков А.А., Рекунович А.С. Повышение эффективности очистки сточных вод – как инструмент защиты водоемов от загрязнения .*Науковий симпозіум «Тиждень еколога - 2019»,* 7 -10 жовтня, 2019, Кам'янське, ДДТУ. – С.110 -111с.

13. Беляев Н.Н., Козачина В.А., Лемеш М.В.,Кириченко П.С. Компьютерное моделирование очистки сточних вод. *Матеріали V Міжнародної науково – технічної конференції «Комп'ютерне моделювання та оптимізація складних систем»,* 6 – 8листопада 2019, м. Дніпро, с.22.

14. Беляев Н.Н., Козачина В.А., Лемеш М.В.,Кириченко П.С. Математические модели в задачах очистки сточных вод.*МатеріалиIX Міжнародної наукової конференції «Ресурс і безпека екплуатації конструкцій, будівель та споруд»,*15 -16 жовтня 2019, Харків, ХНУБА. С. 5.

Наукові праці, які додатково відображають наукові результати дисертації

15. Лемеш М.В., Біляєв М.М., Татарко Л.Г., Якубовська З.М. Моделювання біологічного очищення стічних вод на базі камерних моделей // *Наука та прогрес транспорту.* – 2020. – № 3 (87). – С. 16–24. *(Видання включено до міжнародної наукометричної бази Index Copernicus)*

ABSTRACT

Lemesh Maksym Viktorovych. Improvement of methods for calculation of biological treatment facilities. – Qualifying scientific work on the rights of manuscript.

Thesis for PhD degree in specialty 192 – Building and Civil Engineering. – Dnipro National University of Railway Transport named after Academician V. Lazaryan. – Dnipro National University of Railway Transport named after Academician V. Lazaryan, Dnipro, 2020.

The dissertation is devoted to the development of methods to evaluate the efficiency of wastewater treatment in bioreactor – aeration tank.

Biological wastewater treatment is widely used in all countries of the world, because it is an effective mean of eliminating organic pollutants. At the stage of designing or reconstruction of existing biological treatment facilities (bioreactors), there is a need to quickly assess the efficiency of the facilities for new operating conditions. Over time, the design of bioreactors, their modes of operation have become significantly more complicated. Very often the operating conditions of modern bioreactors differ from the "typical", when, for calculation of bioreactors, the existing engineering methods of calculation cannot be used. Engineering methods do not take into account a number of important parameters that affect the process of biological wastewater treatment in aeration tanks, for example, engineering methods do not take into account the shape of the bioreactor, the presence of mobile carriers with sludge, the presence of additional structural elements in the structure. Therefore, engineering methods do not meet, in some cases, modern requirements. Therefore, the development of modern methods of

computer modeling of the multifactor process of wastewater treatment in biological reactors, in order to determine the efficiency of their work – is an important scientific task.

Scientific novelty of the obtained results:

For the first time:

- developed a method for evaluating the efficiency of a biological reactor for wastewater treatment, based on two-dimensional models of fluid dynamics, mass transfer and biological treatment, which allows quickly to calculate the efficiency of waste water treatment in bioreactor taking into account its design features;

- developed a method for assessing the efficiency of a biological reactor for wastewater treatment, based on three-dimensional models of fluid dynamics, mass transfer and biological treatment, which allows quickly to calculate the efficiency of waste water treatment in bioreactor taking into account its design features;

- developed a method for evaluating the efficiency of a biological reactor for wastewater treatment, based on two-dimensional models of fluid dynamics, mass transfer and biological treatment, which allows quickly to calculate the efficiency of wastewater treatment in a bioreactor with a mobile biocenosis.

Improved:

- method of calculating the bioreactor for wastewater treatment, based on balance models of biological wastewater treatment, which, in contrast to existing ones, takes into account changes over time flow rate and concentration of activated sludge, substrate entering the bioreactor.

The practical significance of the results. The methods developed in the dissertation allow quickly to evaluate the efficiency of both classical bioreactors and reactors with additional structural elements, as well as reactors with mobile biocenosis. The time of calculation of the efficiency of the biological reactor, using the developed methods, is a few seconds, which is very important for their practical use in design work. The developed calculation methods will be useful for optimizing the operation of existing biological reactors under variable operating modes.

The results of the dissertation are implemented at company Energoservice-KR, and are also used in the educational process of the Dnipro National University of Railway Transport named after Academician V. Lazaryan for students majoring in "Water Supply and Wastewater Treatment".

System analysis of scientific publications has shown that, in the world, the most actively zero-dimensional mathematical models are used for calculation of reactors for biological wastewater treatment. However, these models do not take into account time-varying wastewater flow rates, as well as time-varying concentrations of substrate entering the reactor. Analysis of the literature also showed that there is a shortage of methods for calculating bioreactors for wastewater treatment, which allow to calculate the fluid dynamics and multidimensional mass transfer processes in the bioreactor. The calculation based on existing models implemented in commercial codes takes several days. In Ukraine, there are no models for calculating bioreactors that would take into account their geometric shape and the formation of a non-uniform field of concentration of activated sludge and substrate in the reactor. Therefore, the urgent task is to create mathematical models for the calculation of bioreactors with suspended or mobile biocenosis.

For quick calculation of bioreactors for wastewater treatment, two balance models were developed, which allow to calculate the process of biological wastewater treatment taking into account changes over time flow rate of wastewater entering the reactor and the input concentration of the substrate, as well as changes over time sludge entering the reactor and its concentration.

In order to take into account the influence of fluid dynamics of wastewater flow in the reactor, as well as the mass transfer of the substrate on the efficiency of the bioreactor, two-dimensional numerical model was developed. The first-order equation is used to calculate the oxidation process of the substrate in this model. This model can be used to conduct "pilot" calculations of the reactor to determine its efficiency. To model the operation of the biological reactor taking into account the fluid dynamics of wastewater flow in the reactor, as well as mass transfer of

substrate and activated sludge, another numerical model was built, in which the calculation of biological wastewater treatment is based on Monod equations. In addition to this model, a three-dimensional mathematical model of the biological reactor operation based on Monod equations, mass transfer equations for substrate and activated sludge has been developed. The model allows to calculate the operation of a biological reactor taking into account the nonuniform flow field in the structure.

In dissertation dynamic numerical models for calculating the process of biological water treatment in reactors with moving carriers were developed.

The basis of the developed numerical models are finite-difference schemes. Difference splitting schemes are used for numerical integration of two-dimensional and three-dimensional equations of hydrodynamics (Laplace equation for velocity potential). At each step of splitting, the calculation of the unknown value of the velocity potential is carried out by the method of explicit formula. This allows to build a simple program for implementing a numerical model. The basis of the developed numerical models for calculation of the fields of substrate concentration, activated sludge concentration in bioreactor, as well as the concentration of mobile carriers of the biocenosis difference schemes of splitting were used. The peculiarity of these difference schemes is that the determination of the unknown value of the concentration of the substrate, activated sludge, the concentration of mobile carriers of the biocenosis is realized according to an explicit scheme. The dissertation describes the developed software packages that implement computer calculation on the basis of developed numerical models. Verification of constructed numerical models was performed.

To illustrate the possibilities and working range of developed numerical models, solution of different applied problems is presented. All tasks belong to the most complex class of non-stationary tasks of biological wastewater treatment. The problems considered in the dissertation, can be divided into four groups. The first group of tasks is devoted to determination of the efficiency of bioreactors for wastewater treatment based on the basis of balance numerical models. When

conducting computational experiments, the dynamics of the process of biological wastewater treatment at different modes of operation of treatment facilities has been determined. The second group of tasks is devoted to determination of efficiency of bioreactors on the basis of developed two-dimensional numerical models. Problems which were solved were devoted to determination of efficiency of the reactors with additional elements, and for injection of activated sludge into the working volume of the reactor. The third group of tasks is devoted to determination of the efficiency of bioreactors with mobile carriers with sludge . Studies have been conducted for bioreactors with different options for the location of units with movable carriers of the biocenosis inside reactor. The fourth group of problems is devoted to determination of efficiency of bioreactors based on the basis of developed three-dimensional numerical models. The research was conducted for bioreactors with different options for the location of additional plates in the structure. The results of the conducted researches show that the developed methods of calculation of bioreactors allow to carry out calculations at a new qualitative and quantitative level.

Keywords: water treatment, water use, biological reactor, numerical modeling, Monod model, moving bed biofilm reactor

ЗМІСТ

ВСТУП 16
РОЗДІЛ 1 АНАЛІЗ СТАНУ ПРОБЛЕМИ, ЩО ВИВЧАЄТЬСЯ 21
1.1Типи біологічних реакторів для очищення стічних вод 21
1.2 Аналіз математичних моделей, які застосовують для розрахунку біореакторів 25
1.3 Метод фізичного моделювання для дослідження роботи біореакторів 31
1.4 Вибір напрямку дисертаційного дослідження 33
Висновки до розділу 1 33
РОЗДІЛ 2 МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ БІОЛОГІЧНОГО ОЧИЩЕННЯ ВОДИ 35
2.1 Специфічність процесів біологічного очищення стічних вод 35
2.2 Камерна модель біологічного очищення води в умовах нелімітованого кисневого режиму 36
2.3 Аналітичний аналіз моделі Monod 38
2.4 Чисельні нульвимірні моделі біологічного очищення води в аеротенку42
2.5 Модель біологічного очищення води з урахуванням нерівномірності розподілу концентрації субстрату в споруді 43
2.6 Тривимірна модель біологічного очищення води, яка враховує нерівномірність розподілу концентрації субстрату та активного мулу в споруді 51
2.7 Двовимірна модель біологічного очищення води, що враховує нерівномірність розподілу концентрації субстрату та активного мулу в споруді 57
Висновки до розділу 2 60
РОЗДІЛ 3 МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ОЧИЩЕННЯ ВОДИ В СПОРУДАХ З РУХОМИМ БІОЦЕНОЗОМ 62
3.1 Квазідинамічна модель біологічного очищення води в аеротенку в разі використання рухомого біоценозу 62

3.2 Модель біологічного очищення води в аеротенку з урахуванням руху носіїв біоценозу в реакторі 69
3.3 Чисельне розв’язання моделюючих рівнянь 71
Висновки до розділу 3 76
РОЗДІЛ 4 ДОСЛІДЖЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ОЧИЩЕННЯ ВОДИ В БІОРЕКТОРАХ, ВИКОНАНЕ МЕТОДОМ КОМП’ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ 77
4.1 Практичне використання балансових моделей для оцінки ефективності роботи біоректора 77
4.2 Практичне використання двовимірних моделей оцінювання ефективності роботи біореактора 86
4.3 Керування ефективністю очищення стічних вод у біологічних реакторах шляхом точкового впорскування активного мулу та використання пластин 94
4.4 Дослідження роботи біологічного реактора на базі 3D-моделі 100
4.5 Моделювання роботи реактора з рухомим біоценозом 105
4.6 Верифікація розроблених методів 115
Висновки до розділу 4 120
ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ 122
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ 124
ДОДАТОК А ВІДОМОСТІ ПРО ВПРОВАДЖЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДОСЛІДЖЕННЯ 139
Додаток Б СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ 142

ВСТУП

Сутність науково-прикладної проблеми, яка розглядається в роботі, полягає в розробці ефективних методів оцінювання ефективності очищення стічних вод у біореакторах-аеротенках шляхом розробки багатофакторних чисельних моделей.

Актуальність теми. Біологічне очищення є одним з найпотужніших методів обробки стічних вод. Визначення ефективності такого очищення на етапі проєктування або реконструкції біореакторів, у яких здійснюється такий спосіб обробки стічних вод, потребує використання спеціальних математичних моделей та методів розрахунку. Крім того, ці теоретичні методи розрахунку є основним інструментарієм, оскільки для проведення фізичного експерименту в галузі біологічного очищення завжди необхідні значний час та коштовне обладнання. На сьогодні розроблена значна кількість математичних моделей, що дозволяють з різним ступенем наближення визначати ефективність роботи біореакторів. Але вони не враховують багатьох важливих параметрів, що впливають на ефективність роботи біореакторів: геометричну форму та конструктивні особливості реакторів, гідродинаміку руху в них активного мулу та субстрату, наявність додаткових елементів, різні режими експлуатації. Тому розробка математичних моделей для оцінки ефективності роботи біологічних реакторів, які б дозволяли враховувати ці важливі фактори та швидко визначати значення необхідних для проєктувальника параметрів, є важливим науковим завданням.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертація виконана відповідно до державної програми «Про концепцію розвитку водного господарства України». Робота пов'язана з планами науково-дослідних робіт Дніпровського національного університету «Моделювання масопереносу та гідродинаміки в системах водопостачання, водовідведення та в водних об’єктах» (номер держреєстрації 0115U007225), а

також в рамках договору № 01/2015-І від 15.01.2015 про науково-технічне співробітництво між ДНУЗТ і Дніпропетровським обласним управлінням водних ресурсів.

Мета і завдання роботи. Метою дисертаційної роботи є розроблення сучасних методів математичного моделювання процесів очищення стічних вод у біологічних реакторах-аеротенках.

Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити такі завдання:

- виконати аналіз сучасного стану методів, що використовуються для аналізу ефективності очищення стічних вод у біологічних реакторах;

- розробити новий метод розрахунку реакторів, що базується на використанні нульвимірних моделей біологічного очищення стічних вод;

- розробити новий метод розрахунку реакторів, що базується на використанні 2D CFD-моделей біологічного очищення стічних вод;

- розробити новий метод розрахунку реакторів, що базується на використанні 3D CFD-моделей біологічного очищення стічних вод;

- розробити новий метод розрахунку біологічних реакторів з рухомим біоценозом, що базується на використанні 2D CFD-моделей біологічного очищення стічних вод;

- здійснити програмну реалізацію побудованих методів розрахунку біологічних реакторів;

- виконати тестування розроблених CFD-моделей;

- провести дослідження на основі розроблених CFD-моделей роботи реакторів для біологічного очищення стічних вод.

Об'єкт дослідження – процес очищення стічних вод у біологічних реакторах-аеротенках.

Предмет дослідження – методи теоретичного визначення параметрів масопереносу, які характеризують ефективність біологічного очищення стічних вод в аеротенках.

Методи дослідження – математичне моделювання процесів гідродинаміки, масопереносу та біологічного очищення стічних вод на базі

фундаментальних рівнянь суцільного середовища. Для чисельного розв'язання моделюючих рівнянь використовують скінченно-різницеві схеми розщеплення. Верифікація теоретичних результатів виконана шляхом зіставлення їх з аналітичними розв'язками відомих крайових задач та з результатами відомих експериментальних досліджень.

Наукова новизна отриманих результатів.

Уперше:

- розроблено метод оцінювання ефективності роботи біологічного реактора для очищення стічних вод, що базується на використанні двовимірних моделей гідродинаміки, масопереносу та біологічного очищення, який дозволяє швидко розрахувати ефективність очищення води в споруді з урахуванням її конструктивних особливостей, режиму роботи;
- розроблено метод оцінювання ефективності роботи біологічного реактора для очищення стічних вод, що базується на використанні тривимірних моделей гідродинаміки, масопереносу та біологічного очищення, який дозволяє швидко розрахувати ефективність очищення води в споруді з урахуванням її конструктивних особливостей, режиму роботи;
- розроблено метод оцінювання ефективності роботи біологічного реактора для очищення стічних вод, що базується на використанні двовимірних моделей гідродинаміки, масопереносу та біологічного очищення, який дозволяє швидко розрахувати ефективність очищення води в споруді з рухомим біоценозом.

Удосконалено:

- метод оцінювання ефективності роботи біореактора для очищення стічних вод, що базується на використанні нульвимірних моделей біологічного очищення стічних вод, який дозволяє, на відміну від існуючих, враховувати зміну з часом витрати та концентрації активного мулу, субстрату, що надходять у біореактор.

Практичне значення отриманих результатів. Розроблені в дисертації методи дозволяють швидко оцінювати ефективність роботи як класичних

біореакторів, так і реакторів з додатковими конструктивними елементами, а також реакторів з рухомим біоценозом. Час розрахунку ефективності роботи біологічного реактора за допомогою розроблених методів становить декілька секунд, що є дуже важливим для їх практичного використання в ході виконання проєктувальних робіт. Розроблені методи розрахунку будуть корисними для оптимізації роботи існуючих біологічних реакторів за змінних режимів роботи.

Результати дисертаційної роботи впроваджені в ТОВ «Енергосервіс-КР»**,** а також використовуються в навчальному процесі Дніпровського національного університету залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна для підготовки студентів, які навчаються за спеціальністю «Водопостачання та водовідведення».

Особистий внесок здобувача. Результати, що висвітлені в дисертації, були отримані особисто автором. Здобувач самостійно сформулював мету дисертації та завдання досліджень. Автор дисертації проаналізував наукові публікації, що присвячені розрахунку ефективності біореакторів для очистки стічних вод та сформулював напрям наукових досліджень; розробив нові методи теоретичної оцінки ефективності роботи реакторів для біологічного очищення стічних вод[1- 6], розробив балансові чисельні моделі для оцінювання ефективністі роботи біореакторів, [15], виконав програмну реалізацію розроблених методів оцінювання ефективністі роботи біореакторів для очистки стічних вод [1 – 15]. Автором здійснена верифікація розроблених методів, наведено обчислювальні експерименти, виконано аналіз отриманих результатів.

Апробація результатів дисертації. Основні результати та головні положення дисертації доповідалися та обговорювалися на: XI Міжнародної науково-практичної конференції *«*Сучасні інформаційні та комунікаційні технології на транспорті, в промисловості та освіті*»,* 13.12.2017 -14.12.2017, Дніпро, 2017; Міжнародної науково- техничної конференції «Інформаційни технології в металургії та машинобудивництве , 27-29 березня, 2018. Дніпро,

2018; IV Міжнародної науково-технічної конференції «Комп'ютерне моделювання та оптимізація систем», 1-2 листопада 2018р. – Дніпро, УДХТУ; XII Міжнародної науково-практичної конференції «Сучасні інформаційні і комунікаційні технології на транспорті, в промисловості та освіті», 12-13 грудня, 2018р. – Дніпро, ДНУЗТ ; XIII Міжнародної науково-практичної конференції «Сучасні інформаційні і комунікаційні технології на транспорті, в промисловості та освіті», 11-12 грудня, 2019р. – Дніпро, ДНУЗТ; Науковому симпозіумі «Тиждень еколога -2019», 7 -10 жовтня, 2019, Кам'янське, ДДТУ; V Міжнародної науково – технічної конференції «Комп'ютерне моделювання та оптимізація складних систем», 6 – 8листопада 2019, м. Дніпро; IX Міжнародної наукової конференції «Ресурс і безпека екплуатації конструкцій, будівель та споруд»,15 -16 жовтня 2019, Харків, ХНУБА.

Публікації. За результатами дисертаційної роботи опубліковано 15 праць, зокрема: 5 статей в наукових фахових виданнях України; 1 – стаття у закордонному науковому періодичному виданні; 1 – стаття в науковому виданні Україні; 8 – тези доповідей.

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається з анотації, вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел і додатків. Загальний обсяг роботи становить 143 сторінки, з них основний текст розміщено на 107 сторінках; містить 66 рисунка, 15 таблиць. Список використаних літературних джерел містить 126 бібліографічних назв.

РОЗДІЛ 1
АНАЛІЗ СТАНУ ПРОБЛЕМИ, ЩО ВИВЧАЄТЬСЯ

У розділі наведено результати аналізу існуючих методів моделювання роботи реакторів для біологічного очищення стічних вод.

1.1 Типи біологічних реакторів для очищення стічних вод

Завдання, пов’язані з очищенням води, є дуже різноманітними [1, 3, 5, 18-20, 29, 31, 35, 36], але розв’язання кожного з них спрямоване на поліпшення її якості. Для розв’язання завдань цього класу використовується велика кількість наукових інструментів та підходів [13, 14, 20, 23, 26, 34, 37, 38]. Біологічне очищення стічних вод є одним з найбільш потужних способів очищення стічних вод різного походження [1, 22, 25, 26, 38, 42]. Незважаючи на велику складність цього процесу, коротко його суть можна описати так: субстрат (забруднювач), що потрапляє в біореактор (споруду, де відбувається біологічне очищення), стає поживним середовищем для мікроорганізмів у біореакторі. Тобто, наявна схема «жертва – хижак».

Існують різні споруди для здійснення біологічного очищення стічних вод:

- біофільтри – у цих спорудах стічна вода фільтрується крізь завантаження, де сформувалася біоплівка (рис. 1.1).

Мікроорганізми в біоплівці адсорбують полютанти та «перетворюють» їх. Використовують біофільтри з площинним завантаження, з жорстким блочним завантаженням, з м’яким завантаженням. Конструкція цих пристроїв різноманітна залежно від умов експлуатації;

- поля фільтрації – здійснюється подача стічних вод на ґрунт та їх очищення за допомогою мікроорганізмів у ґрунті (рис. 1.2);

Рисунок 1.1 – Біофільтр (http://wrmplast.ru/product/481/)

Рисунок 1.2 – Поля фільтрації (https://www.belta.by/photonews/view/polja-filtratsii-skidelskogo-saharnogo-zavoda-13470)

- аеротенки – у цих спорудах активний мул (колонії мікроорганізмів) перебуває в завислому стані й тут відбувається «перетворення» субстрату, що потрапляє в аеротенк. Існують різні типи аеротенків: аеротенки-витискувачі; аеротенки-змішувачі; аеротенки-відстійники; багатокамерні аеротенки – відстійники;

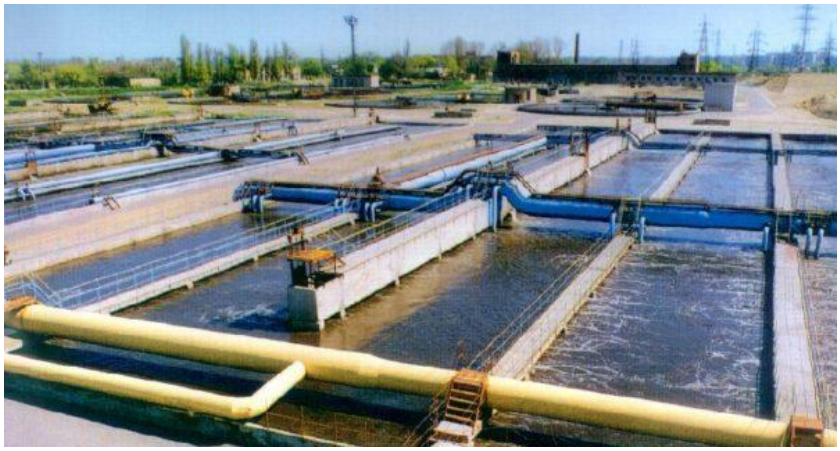


Рисунок 1.3 – Аеротенк (https://topas-site.ru/blog/aerotenki-vidy-printsipy-raboty-osobennosti/)

- циркуляційні окиснювальні канали – це проточні водойми, де відбувається біологічне очищення води;
- біологічні ставки – очищення відбувається в ставках за рахунок властивостей самоочищення водойм.

Зараз значна увага у світі приділяється підвищенню ефективності роботи аеротенків із закріпленим біоценозом (fixed bed biofilm reactor) або з рухомим біоценозом (moving bed biofilm reactor) (рис.1.4, 1.5 відповідно).

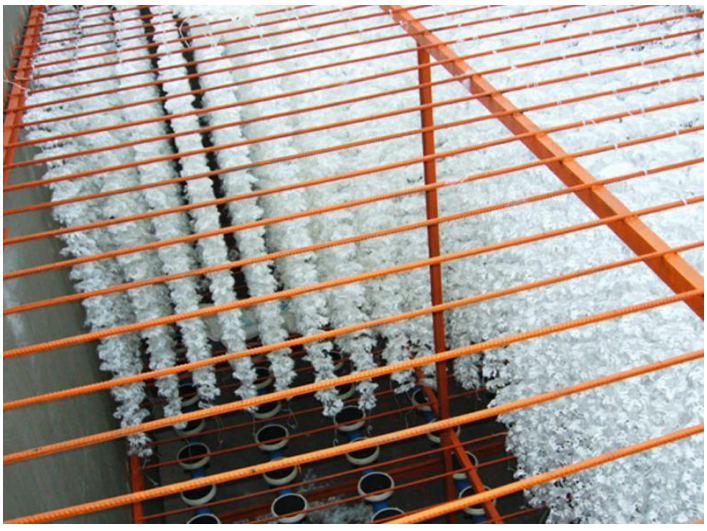


Рисунок 1.4 – Аеротенк із закріпленим біоценозом (https://radikal.ru/lfp/s019.radikal.ru/i612/1203/68/a0d0b51e8fe4.jpg/htm)

Рисунок 1.5 – Аеротенк з рухомим біоценозом
(https://nomitech.ru/articles-and-blog/bioreaktor_s_podvizhnym_nositelem/)

Усередині цих реакторів є додаткові елементи (завантаження), на яких формується біоплівка, де відбувається процес деструкції субстрату. Завантаження може рухатися або ні. Площа цієї біоплівки дуже велика, тому багато мікроорганізмів має можливість контактувати із субстратом у споруді. Такий підхід дозволяє збільшити ефективність роботи біореакторів. Перевагами цих біореакторів є те, що вони надійні, прості в експлуатації, високоефективні та не потребують значного простору для розміщення. У разі використання рухомих блоків (moving carriers), на яких формується біоплівка (рис.1.5), площа контакту може бути від 300 $м^2/м^3$. Розміри, геометрична форма рухомих блоків дуже різноманітні (рис.1.6, 1.7).

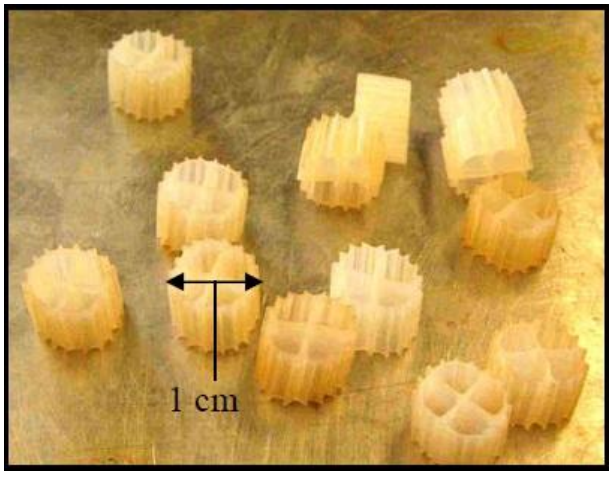


Рисунок 1.6 – Рухоме завантаження для біореактора [91]

Рисунок 1.7 – Рухоме завантаження для біореактора [124]

Незважаючи на різноманітність існуючих споруд біологічного очищення, вони всі мають сумісну платформу: взаємодія мікроорганізмів та субстрату. Склад мікроорганізмів – різноманітний, розподіл мікроорганізмів у споруді – теж. Ці параметри змінюються із часом. Усе це дуже ускладнює теоретичне дослідження процесів біологічного очищення стічних вод.

Аналіз літературних джерел показує, що для обґрунтування вибору конкретного біореактора насамперед необхідно визначити його ефективність. Крім цього, дуже важливо прогнозувати ефективність роботи біореактора у випадку зміни умов експлуатації. Основним методом розв’язання цієї задачі є метод математичного моделювання.

1.2 Аналіз математичних моделей, які застосовують для розрахунку біореакторів

Теоретичний аналіз процесів біологічного очищення стічних вод є дуже складним та відповідальним завданням. Складність полягає насамперед у тому, що процес біологічного очищення є багатофакторним, а створення багатофакторних моделей, забезпечення їх необхідними параметрами та «доведення розв’язку до числа» – нетривіальна задача. Крім цього, надзвичайно важливим аспектом є те, що характерною рисою біологічного очищення є тривалість процесу. Тому широке використання фізичного

експерименту на етапі розв'язання проєктних задач не є можливим. З огляду на це розроблення теоретичних методів оцінки роботи біореакторів є особливо важливим завданням.

На основі системного аналізу літературних джерел [26, 34, 37, 39, 51 - 54, 61, 62, 83, 93,102, 115, 117] було визначено групи математичних моделей, які використовують для розрахунку біореакторів у системах очищення стічних вод. По-перше, слід вказати, що існуючи моделі можна поділити на такі групи:

1. Математичні моделі, що орієнтовані на оцінку ефективності роботи біореактора в умовах нелімітованої кількості кисню в споруді.

2. Математичні моделі, що орієнтовані на оцінку ефективності роботи біореактора з урахуванням нерівномірного розподілу кисню в споруді.

3. Математичні моделі, що орієнтовані на оцінку лише кількості кисню в споруді за різних умов його подачі.

Розглянемо групи моделей, що відрізняються підходами до їх побудови.

*Емпіричні моделі***.** Ці моделі створюють основу нормативних та інженерних методик розрахунку біореакторів. Моделі – це алгебраїчні співвідношення, які використовують для визначення тих чи інших параметрів очисних споруд [34, 37, 39, 44]. Наприклад, тривалість аерації в аеротенку визначають так [44]:

$$t = \frac{L_a - L_t}{a \cdot (1 - S_l)\text{c}},$$

де L_a – БПК$_{\text{пов}}$ стічної води, що потрапляє в споруду, L_t – БПК$_{\text{пов}}$ стічної води, що вийшла зі споруди, a – доза активного мулу, S_l – зольність активного мулу, ρ – швидкість окиснення.

Емпіричні моделі дуже зручно використовувати для проєктування типових біореакторів, що працюють у «класичних» умовах експлуатації. Розрахунок на базі цих моделей не потребує багато часу та може бути

виконано без використання комп'ютера. Дуже важливо, що при застосуванні емпіричних моделей використовують параметри, які прямо характеризують умови експлуатації споруди та їх легко визначити: добова витрата стічних вод, параметри стічних вод тощо. Причому кількість таких параметрів – незначна. Але ці моделі мають недоліки:

1. Як усі емпіричні моделі, вони можуть використовуватися лише для тих умов, для яких були визначені конкретні константи, що містить модель.

2. Моделі фактично на враховують гідродинаміку усередині біореактора.

3. Моделі не враховують геометричну форму біореактора.

4. Моделі не враховують детально біологічні аспекти очищення води.

5. Моделі не враховують нерівномірний розподіл субстрату, активного мулу, кисню в реакторі.

Інша група моделей – моделі, в основу яких покладено звичайні диференціальні рівняння, що описують процес біологічного очищення стічних вод. Це нульвимірні моделі, основа яких – балансове співвідношення: «приплив – вихід – приріст (або деструкція)». Нерідко ці моделі мають назву «балансові». Аналіз літературних джерел показав, що саме ці моделі найчастіше використовують для практичних розрахунків або в наукових дослідженнях. Важливим аспектом є те, що за допомогою моделей цієї групи можна визначати константи, які входять у моделі й використовують для теоретичного опису біологічного очищення в реакторі (модель Monod, моделі Harremoes, Stover – Kincannon та інші).

Математичний опис процесу зміни концентрації субстрату S з часом здійснюється за допомогою різних моделей, наприклад таких [18]:

- реакція першого порядку: $\frac{dS}{dt} = k_0 XS$,
- реакція нульового порядку: $\frac{dS}{dt} = k_1 X$,
- реакція змішаного порядку: $\frac{dS}{dt} = \frac{kXS}{k_s + S}$,

де k, k_0 k_1, k_s – емпіричні параметри; X – концентрація мікроорганізмів.

Існують також більш складні моделі, що враховують, наприклад при визначенні $\frac{dS}{dt}$, значення кисню в стічних водах. Безумовно, використання більш складних моделей потребує наукового обґрунтування більшої кількості емпіричних параметрів, що входять у модель. Це – дуже важлива та складна задача.

Слід зауважити, що існуючі нульвимірні моделі, які використовуються для аналізу роботи біореакторів, загалом орієнтовані на розв'язання задач, параметри яких постійні. Наприклад, не враховується змінна з часом витрати стічних вод, а також змінна з часом концентрація субстрату, що надходить у реактор. Це є недоліком, тому що витрата стічних вод є суттєво нерівномірною, тобто вона є змінною з часом на реальних об'єктах. Також змінною з часом є концентрація субстрату в стічних водах, що потрапляють на очищення. Така зміна концентрації може бути пов'язана, наприклад, з виникненням аварії на об'єкті.

Широке використання моделей цієї групи пояснюється тим, що моделюючі рівняння допускають аналітичний розв'язок. У деяких випадках можливе застосування чисельних методів (наприклад, метод Рунге-Кута) для розв'язання звичайних диференціальних рівнянь [26]. Моделі цієї групи застосовують за кордоном у кодах ASM1, ASM2 та інших. У них додатково використовують емпіричні «субмоделі», що дозволяють визначити необхідні для розрахунку реактора параметри (наприклад, модель Monod, модель швидкості деструкції субстрату в біоплівці тощо). Додатковою «субмоделлю» є одновимірне рівняння дифузії, що описує, наприклад, потік субстрату в біоплівку.

Розрахунок на базі моделей цієї групи триває декілька секунд, тобто їх можливо використовувати для виконання серійних розрахунків на практиці.

Такі моделі орієнтовані на вирішення широкого класу задач у галузі аналізу роботи біореакторів: споруд, що працюють, наприклад, як класичні

реактори – аеротенки – змішувачі; реакторів із завислим біоценозом; реакторів з рухомим біоценозом [1, 51, 52, 54]. В Україні зроблено значний внесок у питання створення моделей цієї групи. Актуальні результати наведено в працях акад. О. Я. Олійника, Т. С. Айрапетян, А. С. Карагяура.

Широкий спектр застосування моделей цієї групи пов'язаний з тим, що в їх основу покладено закон збереження маси для субстрату, активного мулу або кисню, тобто використовується універсальне положення механіки суцільного середовища.

Але слід відзначити такі недоліки моделей цієї групи:

1. Не враховується гідродинаміка всередині реактора.

2. Не враховується нерівномірність розподілу концентрації активного мулу та субстрату в реакторі та вплив такої нерівномірності на процес біологічних перетворень.

Інша група моделей – CFD моделі для розрахунку споруд біологічного очищення стічних вод. В основу цих моделей покладено послідовне розв'язання трьох задач – задачі гідродинаміки, задачі масопереносу та задачі біологічного перетворення субстрату. Для розв'язання гідродинамічної задачі найчастіше використовують рівняння Навьє– Стокса. Для розрахунку концентрації активного мулу та субстрату застосовують багатовимірне рівняння масопереносу. Задачу біологічного перетворення субстрату розв'язують за допомогою «субмоделей» різної ієрархії. Ці моделі також використовують для розрахунку кисневого режиму в біореакторі. Тобто моделі цієї групи – теж багатофакторні та крім цього вони дозволяють враховувати вплив руху субстрату, кисню, активного мулу на ефективність біологічного очищення стічних вод.

Важливою перевагою моделей цієї групи є можливість розрахунку нерівномірного розподілу субстрату, активного мулу, швидкості потоку в біореакторі, врахування геометричної форми споруди, місць подачі кисню тощо (рис. 1.8). Як правило, за кордоном, для CFD-моделювання використовують комерційні пакети програм, наприклад пакет ANSYS. Тобто

дослідники дуже рідко розробляють свої CFD-моделі, а використовують уже існуючі пакети програм.

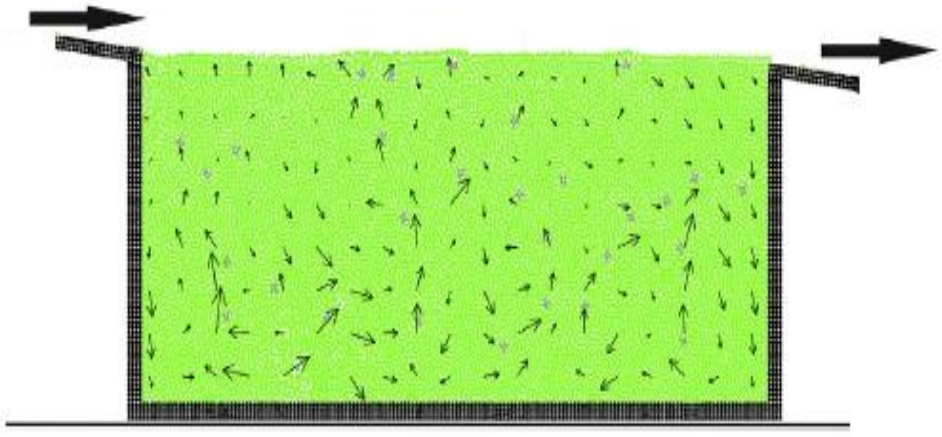


Рисунок 1.8 – CFD-моделювання течії в біореакторі [107]

Аналіз літературних джерел свідчить про те, що частка наукових досліджень на базі CFD-моделей у цій галузі– дуже обмежена. За наявності суттєвих та важливих переваг CFD-моделювання над моделями інших груп, у цих моделей також є певні недоліки:

1. Дуже висока вартість комерційних, ліцензованих пакетів для CFD-моделювання.

2. Необхідність спеціалізованих знань у галузі обчислювальної гідродинаміки, очищення стічних вод у користувача.

3. Необхідність ліцензії у користувача для використання комерційних пакетів у наукових дослідженнях або в прикладних розрахунках.

4. Значні витрати комп’ютерного часу на розрахунок одного варіанта задачі (тривалість розрахунку – декілька діб [93]).

5. Потреба в потужних комп’ютерах для виконання розрахунків, що є суттєвою перешкодою на шляху щоденного використання на практиці.

6. Використання комерційних пакетів CFD-моделювання роботи біореакторів можливо лише в дозволених розробниками пакета межах.

Як свідчить аналіз літературних джерел, в Україні є суттєвий дефіцит самостійно побудованих CFD-моделей.

Слід наголосити, що сьогодні є незначна кількість математичних моделей, що дозволяють розраховувати біореактори із завислим біоценозом.

Також особливо важливо вказати, що для практики необхідні моделі, які можна забезпечити вхідними даними, необхідними для виконання розрахунків (наприклад, параметри для моделей Monod, Graumode тощо).

1.3 Метод фізичного моделювання для дослідження роботи біореакторів

Використання будь-якої математичної моделі для аналізу роботи біологічного реактора неможливо без набору констант, що описують процес біологічної «взаємодії» субстрату та активного мулу. Чим складніша математична модель – тим більша кількість констант необхідна для замикання моделюючих рівнянь. Єдиний шлях визначення цих констант – лабораторний або польовий експеримент [104, 120]. Тому метод фізичного моделювання як спосіб дослідження процесів у реакторі та забезпечення роботи математичних моделей є найважливішим інструментом.

Аналіз літературних джерел показав, що фізичний експеримент у галузі біологічного очищення стічних вод проводиться в різних масштабах:

1. Масштаб № 1– дослідження у всьому об’ємі реактора.

2. Масштаб № 2 – вимірювання біля різних елементів всередині реактора (наприклад, рівень зерен спеціального завантаження).

Особливістю фізичного експерименту в галузі біологічного очищення стічних вод є значна його тривалість (дослідження вимірюються тижнями). Тому фізичний експеримент як щоденний метод дослідження та розв’язання прикладних задач – досить нереальна річ. Крім цього, для проведення експерименту необхідне коштовне, у багатьох випадах – унікальне обладнання (рис. 1.9).

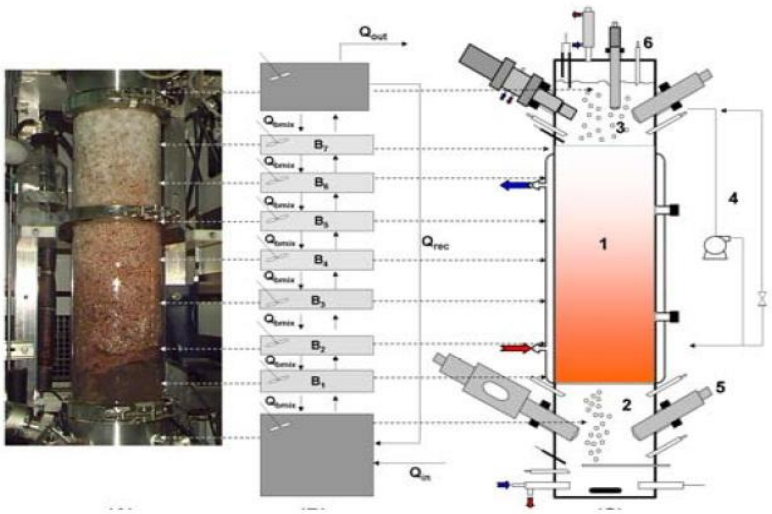


Рисунок 1.9 – Експериментальне обладнання для проведення досліджень у біореакторі [78]

На жаль, сьогодні в Україні є проблеми з таким сучасним обладнанням. Тому публікація результатів експериментальних досліджень, що виконуються за кордоном, є дуже важливим аспектом. Наприклад, наведемо дані щодо значень деяких експериментальних параметрів, що визначалися для практичного використання моделі Monod:

– $м_{max} = 0{,}135$ д$^{-1}$, $K_s = 9{,}75$ мг·л$^{-1}$[105];

– $м_{max} = 0{,}23$ д$^{-1} - 3{,}17$ д$^{-1}$, $K_s = 13{,}8$ мг/л $- 508$ мг/л [120];

– $м_{max} = 3{,}97$ д$^{-1}$, $K_s = 74$ мг·л$^{-1}$[104];

– $м_{max} = 0{,}0324$ д$^{-1} - 0{,}1095$ д$^{-1}$, K_s = 4612 мг·л$^{-1}$ – 6663 мг·л$^{-1}$ [110]; K_s = 5,5 мг·л$^{-1}$- 2130 мг·л$^{-1}$[18]та таке інше.

Як бачимо з наведених даних, існує суттєва різниця між значеннями параметрів, що є очевидним для констант, які визначаються для різних умов експериментальним шляхом.

Фізичний експеримент дозволяє не тільки визначити константи для створення «працездатних» математичних моделей, але також дає можливість виявити деякі особливості процесу, наприклад, як формується, якої форми біоплівка тощо.

Таким чином, можна говорити, що в галузі розроблення та удосконалення методів розрахунку біореакторів сучасний фізичний експеримент відіграє вкрай важливу роль.

1.4 Вибір напрямку дисертаційного дослідження

Аналіз літературних джерел засвідчив, що:

1.Тенденцією у сфері розрахунку біореакторів для очищення стічних вод є створення багатофакторних моделей. Але ці моделі переважно є нульвимірними та мають багато суттєвих недоліків.

2. Очевидним є дефіцит моделей, що дозволяють розраховувати гідродинаміку та процеси масопереносу в біореакторі. Розрахунок на базі існуючих моделей, що реалізовані в комерційних кодах типу ANSYS, триває декілька діб. Це робить незручним використання цих моделей на практиці.

3. Актуальним завданням є створення математичних моделей для розрахунку біореакторів із завислим або рухомим біоценозом.

4. В Україні відсутні CFD-моделі розрахунку біореакторів, що дозволяють враховувати їхню геометричну форму та формування нерівномірного поля концентрації активного мулу та субстрату в реакторі.

З урахуванням вищевказаного, розробка багатофакторних CFD-моделей є актуальним науковим завданням.

Виходячи із наведених міркувань було визначено науковий напрямок цієї роботи – розробка багатофакторних, швидко розрахункових моделей роботи біологічних реакторів – аеротенків для очищення стічних вод.

Висновки до розділу 1

1. Проаналізовано групи моделей, які використовують для розрахунку біореакторів для очищення стічних вод. Аналіз показав, що у світі найбільш активно застосовують нульвимірні математичні моделі, які базуються на законі збереження маси для субстрату, активного мулу або кисню. Але ці

моделі не враховують змінну з часом витрату стічних вод, а також змінну з часом концентрацію субстрату, що надходять у реактор.

2. Аналіз праць, що присвячені розрахунку біореакторів, показав, що на сьогодні існує суттєвий дефіцит методів аналізу роботи біореакторів, що дозволяють врахувати в ході проведення теоретичних досліджень гідродинаміку течії, геометричну форму споруди, режим її роботи.

3. На сьогодні в Україні при розрахунку біореакторів переважно використовують методи розрахунку, які базуються на аналітичному розв'язку моделюючих рівнянь. За такого підходу багатьох факторів неможливо врахувати під час виконання розрахунків.

4. Аналіз літературних джерел свідчить про те, що в Україні та світі при розрахунку гідродинаміки потоку в очисних спорудах використовують CFD-моделі, що реалізовані у вигляді комерційних пакетів програм. Ці моделі потребують значного часу для розрахунку. Моделі не є авторськими.

5. Важливим науковим напрямом є створення CFD-моделей, які дозволяють врахувати найбільш суттєві фактори процесу, що моделюється, але при цьому потребують незначного комп'ютерного часу при практичній реалізації.

РОЗДІЛ 2
МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ БІОЛОГІЧНОГО ОЧИЩЕННЯ ВОДИ

У розділі розглянуто математичні моделі різного рівня, що використовуються в дослідженні для теоретичного аналізу роботи біореактора (аеротенка) [6, 8 – 12, 17, 45, 46, 82, 84, 86, 88 89].

2.1 Специфічність процесів біологічного очищення стічних вод

Предметом цього дослідження є створення методів розрахунку процесів біологічного очищення води в біореакторах-аеротенках. У рамках сучасної термінології розглядається побудова моделей, що належать до класу «diagnostic models» – моделей, які дозволяють швидко моделювати процес очищення води в аеротенку та визначати значення базових параметрів, які важливо знати для проєктування або реконструкції таких споруд.

Як відомо, біологічне очищення води є дуже складним процесом з позиції його математичної формалізації. Створюючи математичні моделі роботи біореактора, важливо враховувати такі параметри та процеси:

1. Кисневий режим.
2. Процес масопереносу субстрату.
3. Процес масопереносу активного мулу.
4. Процес біологічного очищення.
5. Складну геометричну форму споруди, що впливає на гідродинаміку потоку, а отже, на процеси масопереносу.
6. Наявність у реакторі додаткових елементів.
7. Додаткові фактори (наприклад, рух спеціального завантаження в біореакторі).

З формалізованої позиції процеси, що наявні в біореакторі, можна поділити на дві основні групи:

1. Гідродинамічні процеси (рух субстрату, активного мулу; дифузія);

2. Біологічні процеси (ріст біоплівки, розмноження мікроорганізмів та інші).

Очевидно, що врахувати всі параметри, процеси детально є дуже складним завданням, тому в багатьох дослідженнях нехтують тим чи іншим параметром або процесом. Нижче розглянуто побудову математичних моделей, на базі яких здійснюється моделювання процесу біологічного очищення води, з урахуванням названих процесів та факторів.

2.2 Камерна модель біологічного очищення води в умовах нелімітованого кисневого режиму

Розглянемо найбільш спрощену математичну модель біологічного очищення води в біореакторі. Її побудова здійснюється за припущення, що наявний нелімітований кисневий режим. Для проведення швидких пілотних розрахунків будуємо камерну (нульвимірну) чисельну модель. При цьому будемо враховувати такі процеси:

- процес зміни концентрації субстрату з часом;
- процес зміни концентрації активного мулу (субстрату) з часом;
- процес потрапляння в споруду активного мулу (можливе потрапляння різної кількості в різні моменти часу);
- процес потрапляння в аеротенк субстрату (можливе потрапляння різної кількості в різні моменти часу).

Наведемо математичний опис процесу очищення води в біореакторі, що дозволяє врахувати ці фактори. Для цього будемо використовувати закон збереження маси. Розрахункова схема споруди для очистки стічних вод показана на рис. 2.1.

Рівняння матеріального балансу для субстрату та активного мулу в реакторі з урахуванням моделі Monod [113] можна записати так:

$$W \cdot dX = dt \cdot Q_x(t) \cdot X_{in}(t) - dt \cdot Q_x(t) \cdot X + \\ + dt \cdot \mu \cdot W \cdot X - dt \cdot K_d \cdot W \cdot X, \qquad (2.1)$$

$$W \cdot dS = dt \cdot Q_s(t) \cdot S_{in}(t) - dt \cdot Q_s(t) \cdot S(t) \; - dt \cdot \frac{\mu}{Y} \cdot W \cdot X, \qquad (2.2)$$

де W – об'єм реактора; X – концентрація активного мулу в реакторі; t – час; $Q_x(t)$ – витрата активного мулу; $X_{in}(t)$ – концентрація активного мулу, що потрапляє в аеротенк; K_d – коефіцієнт вимирання активного мулу; S – концентрація субстрату в споруді; $S_{in}(t)$ – концентрація субстрату, що потрапляє в споруду; $Q_s(t)$ – витрата субстрату; μ – коефіцієнт; Y – параметр.

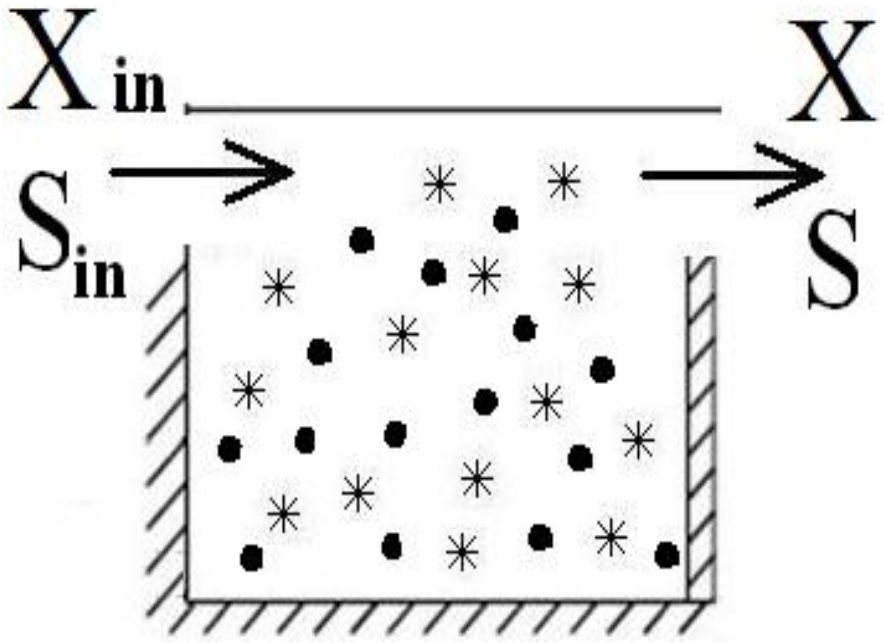


Рисунок 2.1 – Розрахункова схема споруди

Рівняння (2.1), (2.2) описують зміну концентрації активного мулу та субстрату в споруді за час dt. Ця модель належить до нульвимірних. Її недоліком є те, що вона не враховує нерівномірність розподілу концентрації активного мулу та субстрату в біореакторі. Крім цього, значення параметрів *S, X*, які визначають на базі виразів (2.1), (2.2), стосуються концентрацій на виході з біореактора, а не всередині споруди. Тобто немає можливості визначати ефект біологічного очищення в різних частинах споруди.

Наведемо залежність для визначення параметра μ, що входить у рівняння (2.1), (2.2) [113]:

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{S}{S + K_s}, \qquad (2.3)$$

де $\mu_{\max}$ – коефіцієнт; K_s – коефіцієнт Monod.

Значення параметрів рівнянь (2.1)-(2.3) визначаються експериментальним шляхом та наведені в наукових публікаціях, наприклад: K_d = 0,055 д$^{-1}$, K_s = 100 мг·л$^{-1}$, $\mu_{\max}$ =1,04 д$^{-1}$; Y=0,55 [113].

Для системи рівнянь (2.1), (2.2) потрібно надати початкові умови при *t=0:*

$$X=X_0,\ S=S_0\,. \qquad (2.4)$$

Поряд з моделлю (2.1), (2.2) розглянемо більш спрощену модель

$$W \cdot dS = dt \cdot Q_s(t) \cdot S_{in}(t) - dt \cdot Q_s(t) \cdot S(t)\ - W \cdot dt \cdot K_1 \cdot S\,, \qquad (2.5)$$

де K_1 – емпірична константа, ще враховує зміну концентрації субстрату внаслідок біологічного очищення [105]. Моделююче рівняння (2.5) являє собою закон збереження маси субстрату з урахуванням того, що в реакторі наявний рух стічних вод та перетворення субстрату зі швидкістю, яка задається параметром K_1.

На відміну від праці [105], у моделі (2.5) враховується зміна з часом витрати стічних вод та концентрації субстрату, що надходять у біореактор.

2.3 Аналітичний аналіз моделі Monod

Для опису процесу біологічного очищення стічних вод в аеротенку часто застосовують модель Monod, яка також використана в рівняннях (2.1), (2.2). Ця модель має вигляд [113]

$$\frac{dX}{dt} = \mu X - K_d X\,, \qquad (2.6)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\text{м}}{Y} X\,. \qquad (2.7)$$

До цих рівнянь додається залежність (2.3).

Система рівнянь моделі Monod містить декілька параметрів, що визначаються експериментальним шляхом [104, 120]. Коло зміни цих параметрів дуже широке, тому що вони залежать як від конкретних умов середовища, де відбувається очищення стічних вод, так і від конкретних видів мікроорганізмі в параметрів моделі Monod. Але дуже важливо знати, які з них є особливо важливими для визначення прогнозного значення концентрації субстрату в біореакторі. Коли така інформація буде, слід спрямовувати експериментальні дослідження на більш детальне та коректне визначення цих параметрів.

Для розв'язання цієї задачі виконаємо аналітичний аналіз рівнянь моделі Monod [77, 113]. Знехтуємо значенням коефіцієнта K_d, тобто приймаємо $K_d = 0$. Це допускається, коли розрахунковий крок за часом дуже малий. Здійснимо перехід до фазових змінних: розділимо рівняння (2.7) на рівняння (2.6) та отримаємо:

$$\frac{dS}{dX} = -\frac{1}{Y}. \tag{2.8}$$

Таким чином, у моделі Monod суттєве значення має коефіцієнт Y [77]. З рівняння (2.8) ми бачимо, що при зміні аргумента – концентрації активного мулу – на величину dX, буде спостерігатися зміна концентрації субстрату на величину dS, пропорційно константі $-\frac{1}{Y}$.

Ділимо змінні в (2.8) та інтегруємо

$$\int dS = -\frac{1}{Y}\int dX.$$

Далі отримуємо

$$S = -\frac{1}{Y}X + C. \tag{2.9}$$

Тобто у фазовій площині (S, X) ми маємо набір прямих. Виходячи з фізичних міркувань, а саме: значення S, X не можуть бути від'ємними, то у фазовій площині потрібно розглядати перший квадрант для цих фазових

прямих. Значення константи C можна визначити на основі початкових значень S, X.

Якщо прийняти, наприклад, Y=0,55 [113], то $\frac{1}{Y} \approx 2$. Тоді можна записати

$$\frac{dS}{dX} = -2 \qquad (2.10)$$

або

$$S = -2X + C. \qquad (2.11)$$

З рівняння (2.10) ми бачимо, що збільшення концентрації активного мулу на величину dX приводить до зменшення кількості субстрату на величину практично вдвічі більшу.

Виконаний аналіз не враховує такий важливий параметр, як час. Тому продовжимо аналіз моделі Monod. Для більшої наочності скористаємося чисельними даними. Розглянемо тільки рівняння (2.7), що описує динаміку зміни концентрації субстрату з часом в біореакторі, а саме рівняння

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\text{м}}{Y} X.$$

Зробимо припущення, що X=const (принцип заморожених коефіцієнтів). Приймаємо: $\text{м}_{\max} = 1,04\,1/\text{д}$, Y=0,55 [113]. Також приймаємо, що $K_s \angle\angle S$. Тоді можна приблизно записати так:

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{S}{S + K_s} \approx \mu_{\max}.$$

З урахуванням цього рівняння зміна концентрації субстрату з часом можна подати так:

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\text{м}_{\max}}{Y} X,$$

або в чисельному вигляді

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1,04}{0,55} X = 1,89X \approx 2X.$$

Запишемо це рівняння в різницевому вигляді (метод Ейлера, [60])

$$S^{n+1} = S^n - 2X \cdot dt.$$

Нас цікавить час, коли концентрація субстрату в біореакторі буде дорівнювати нулю, тобто $S^{n+1} = 0$. Тоді маємо

$$0 = S^n - 2X \cdot dt.$$

Звідси

$$dt = \frac{S^n}{2X} \cdot$$

Це проміжок часу, коли процес очищення закінчиться. Приймаємо, що на початок очищення *t*=0: $S^n = 140$ мг/л, $S^n = 1500$ мг/л [44]. Тоді проміжок часу, за який буде здійснено повне очищення

$$dt = \frac{140}{2 \cdot 1500} = 0,046 \text{ д.}$$

Тобто процес очищення відбувається досить швидко.

Виконуючи це аналітичне дослідження, ми не враховували ріст концентрації *X* мікроорганізмів з часом (рівняння (2.6)). У реальності з часом буде відбуватися збільшення параметра *X*, а значить – збільшення знаменника в розрахунковій формулі. Чисельник буде зменшуватися, оскільки з часом зменшується концентрація субстрату в реакторі. У результаті спостерігатиметься ще більше зменшення проміжку часу повного очищення стічних вод.

Безумовно, за інших розрахункових параметрів моделі Monod ми будемо мати інший результат. Такі наближення, які були прийняті при виконанні аналізу, – допустимі, оскільки параметри процесу біологічного очищення визначаються експериментальним шляхом протягом декількох діб, а потім осереднюються. Тобто в реальності параметри моделі є дуже наближеними.

Слід підкреслити, що виконаний математичний аналіз моделі Monode є приблизним, але він дозволяє прослідкувати певні риси цієї моделі.

2.4 Чисельні нульвимірні моделі біологічного очищення води в аеротенку

Розв'язання моделюючих рівнянь (2.1), (2.2) дозволяє визначати значення концентрації активного мулу та субстрату в аеротенку з часом, тобто прогнозувати ефективність його роботи. Але ця система є системою нелінійних рівнянь. Тому для чисельного інтегрування нелінійних рівнянь (2.1), (2.2) будемо використовувати метод Ейлера [60]. Тоді розрахункові залежності будуть мати вигляд

$$X^{n+1} = X^n + dt \cdot Q_{xw}(t^n) \cdot X^n{}_{in}(t^n) -$$

$$-dt \cdot Q_{xw}(t^n) \cdot X^n + dt \cdot \mu^n \cdot X^n - dt \cdot K_d \cdot X^n, \qquad (2.12)$$

$$S^{n+1} = S^n + dt \cdot Q_{sw}(t^n) \cdot S^n{}_{in} - dt \cdot Q_{sw}(t^n) \cdot S^n{}_{in}(t) -$$

$$-dt \cdot \frac{\mu^n}{Y} X^{n+1}, \qquad (2.13)$$

де $Q_{sw} = \frac{Q_s}{W}$, $Q_{xw} = \frac{Q_x}{W}$.

На базі розрахункових залежностей (2.12) та (2.13) визначається значення концентрації активного мулу та субстрату в біореакторі на новому часовому кроці (n+1). У розрахунку застосовуються параметри з попереднього часового кроку n. Для початку розрахунку використовуються значення параметрів при $t=0$, тобто відомі початкові дані. Наголосимо ще раз, що модель (2.12), (2.13) відрізняється від відомих моделей тим, що в ній враховується зміна витрати субстрату та активного мулу з часом, а також зміна з часом концентрації активного мулу та субстрату, що потрапляють у споруду.

Для чисельного розв'язання рівняння (2.5) використовується залежність, отримана на базі методу Ейлера [60]:

$$S^{n+1} = S^n + dt \cdot Q_{sw}(t^n) \cdot S^n{}_{in} - dt \cdot Q_{sw}(t^n) \cdot S^n -$$

$$-dt \cdot K_1 \cdot S^n. \qquad (2.14)$$

Для кодування різницевих рівнянь (2.12)–(2.14) використовувався FORTRAN. Створено код *BIO-1*. Для використання коду *BIO-1* потрібно задати такі вхідні дані:

- $X_{in}(t)$ – концентрацію активного мулу, що потрапляє в біореактор;

- $S_{in}(t)$ – концентрацію субстрату, що потрапляє в біореактор;

- W – об'єм біореактора;

- $Q_s(t)$ – витрату з часом субстрату;

- $Q_x(t)$ – витрату з часом активного мулу;

- Y – параметр моделі Monod.

На базі залежності (2.14) створено код *BIO-12*. Для його використання потрібно задати такі вхідні дані:

- $S_{in}(t)$ – концентрацію субстрату, що потрапляє в біореактор;

- W – об'єм біореактора;

- $Q_s(t)$ – витрату з часом субстрату;

- K_1 – параметр.

Практичне використання побудованих чисельних моделей розглянуто далі.

2.5 Модель біологічного очищення води з урахуванням нерівномірності розподілу концентрації субстрату в споруді

Як вказувалося вище, суттєвим недоліком камерних моделей, що були побудовані в п. 2.3-2.4, є те, що вони не враховують нерівномірність розподілу концентрації активного мулу та субстрату в біореакторі. Тому дуже важливо мати математичні моделі, що давали б можливість швидко оцінювати ефективність біологічного очищення води в біореакторі, але без цього недоліка.

Наголосимо, що нерівномірність розподілу концентрації субстрату, активного мулу в біореакторі пов’язана насамперед з рухом потоку та дифузією. Тому при створенні математичних моделей оцінки ефективності роботи біореактора потрібно врахувати ці процеси. У нашому дослідженні для розв’язання цієї задачі розроблено дві моделі. У цьому розділі розглядається перша модель – спрощена модель масопереносу субстрату в біореакторі, у якій враховується нерівномірний розподіл швидкості потоку в споруді та дифузія, а процес біологічного очищення моделюється рівнянням першого порядку. Розрахункова схема біореактору показана на рис. 2.2.

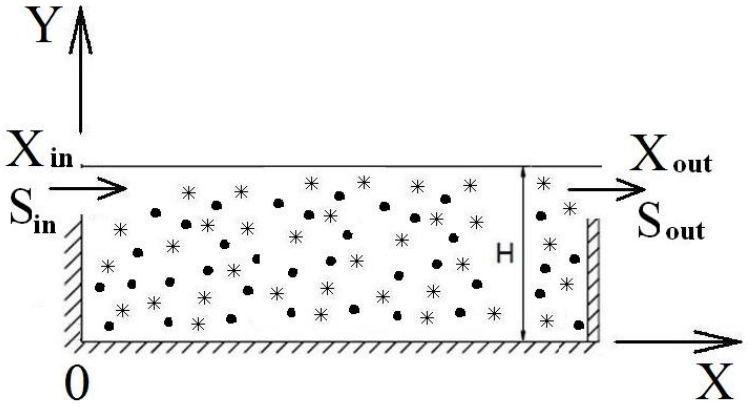


Рисунок 2.2 – Розрахункова схема біореактору

Моделююче рівняння процесу біологічного очищення води має вигляд

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{\partial uS}{\partial x}+\frac{\partial vS}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\text{м}_x\frac{\partial S}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\text{м}_y\frac{\partial S}{\partial y}\right)-K_1S, \qquad (2.15)$$

де S – концентрація субстрату в споруді; t – час; u, v – компоненти швидкості; μ_x,μ_y – коефіцієнти дифузії; K_1 – емпіричний коефіцієнт швидкості «споживання» субстрату.

У (2.15) використовується осереднене значення концентрації субстрату. Наприклад, якщо осереднення здійснювалося по глибині H біореактора (планова модель), то формула осереднення така:

$$S(x,y)=\frac{1}{H}\int S(x,y,z)dz.$$

Зауважимо, що модель (2.15), з позиції розрахунку процесу біологічного очищення, являє собою так звану *BlackBox* модель. Ця модель не передбачає заглиблення в тонкощі того, , як відбувається процес біологічного очищення, а лише висвітлює, що швидкість процесу очищення визначається величиною параметра K_1. Цей параметр встановлюється експериментальним шляхом.

Як відомо, моделі такого рівня часто використовують для виконання пілотних прогнозних розрахунків на етапі реконструкції або проєктування. Основне завдання використання цієї моделі – це отримання надійних даних відносно параметра K_1.

Для розв'язання задачі гідродинаміки, тобто для визначення швидкості течії в біореакторі, використовується модель безвихрової течії [48, 71]:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} = 0, \qquad (2.16)$$

де P – потенціал швидкості.

Знаючи поле потенціалу, значення швидкості потоку в біореакторі визначається за формулами [48, 71]:

$$u = \frac{\partial P}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial P}{\partial y}. \qquad (2.17)$$

Розглянемо граничні умови для моделюючих рівнянь [48, 71]:

- на поверхнях споруди: $\frac{\partial P}{\partial n} = 0$, $\frac{\partial S}{\partial n} = 0$, де n – одиничний вектор зовнішньої нормалі до твердої стінки;

- на вхідній границі: $\frac{\partial P}{\partial n} = V_n$, $S = S_{in}$, де V_n – швидкість течії; S_{in} – відома концентрація;

- на границі витоку зі споруди: $P = P_0 + const$, $\frac{\partial S}{\partial n} = 0$.

За допомогою моделі (2.15) можна дуже швидко виконати пілотні розрахунки – час розрахунку становить 4 с.

Модель має такі переваги:

1. Дає можливість розраховувати процес очищення води з урахуванням нерівномірного розподілу субстрату в споруді для біологічного очищення.

2. Дає можливість розраховувати процес біологічного очищення з урахуванням гідродинаміки течії в споруді.

3. На базі моделі є можливість розраховувати процес біологічного очищення з урахуванням геометричної форми споруди.

Розглянемо метод чисельного розв'язання рівняння (2.15). Для його розв'язання використовується метод сіток та локально одновимірна різницева схема [60]. Виконаємо розщеплення рівняння (2.15) так [60]:

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{\partial uS}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\text{м}_x\frac{\partial S}{\partial x}\right),$$

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{\partial vS}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial y}\left(\text{м}_y\frac{\partial S}{\partial y}\right), \qquad (2.18)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t}=-K_1 S\,.$$

Перші два рівняння із системи (2.18) описують процес переносу субстрату в напрямках *X* та *Y*. Третє рівняння описує зміну концентрації субстрату із часом внаслідок «поглинання» його активним мулом.

Розглянемо різницеві залежності, за допомогою яких розраховують концентрацію субстрату в біореакторі. На першому кроці розрахункова залежність має вигляд [71]

$$S_{ij}^{n+\frac{1}{2}}=S_{ij}^{n}-\triangle t\,\frac{u_{i+1j}^{+}S_{ij}^{n+\frac{1}{2}}-u_{ij}^{+}S_{i-1j}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle x}+$$

$$+\triangle t\text{м}\frac{-S_{ij}^{n+\frac{1}{2}}+S_{i-1j}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle x^2}+\triangle t\text{м}\frac{-S_{ij}^{n}+S_{i+1j}^{n}}{\triangle x^2}. \qquad (2.19)$$

На другому кроці розрахункова залежність така:

$$S_{ij}^{n+1} = S_{ij}^{n+\frac{1}{2}} - \triangle t \frac{u_{i+1j}^{-} S_{i+1j}^{n+1} - u_{ij}^{-} S_{ij}^{n+1}}{\triangle x} +$$

$$+ \triangle t_{\text{м}} \frac{-S_{ij}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i-1j}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle x^2} + \triangle t_{\text{м}} \frac{-S_{ij}^{n+1} + S_{i+1j}^{n+1}}{\triangle x^2} . \qquad (2.20)$$

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

Для другого рівняння різницеві схеми мають вигляд:

- на першому кроці

$$S_{ij}^{n+\frac{1}{2}} = S_{ij}^{n} - \triangle t \frac{v_{ij+1}^{+} + S_{ij}^{n+\frac{1}{2}} - v_{ij}^{+} S_{ij-1}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle y} +$$

$$+ \triangle t_{\text{м}} \frac{-S_{ij}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i-1j}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle y^2} + \triangle t_{\text{м}} \frac{-S_{ij}^{n} + S_{i+1j}^{n}}{\triangle y^2}, \qquad (2.21)$$

- на другому кроці:

$$S_{ij}^{n+1} = S_{ij}^{n+\frac{1}{2}} - \triangle t \frac{v_{ij+1}^{-} S_{i+1j}^{n+1} - v_{ij}^{-} S_{ij}^{n+1}}{\triangle y} +$$

$$+ \triangle t_{\text{м}} \frac{-S_{ij}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i-1j}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle y^2} + \triangle t_{\text{м}} \frac{-S_{ij}^{n+1} + S_{i+1j}^{n+1}}{\triangle y^2}, \qquad (2.22)$$

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

Для розрахунку зміни концентрації субстрату внаслідок біологічного очищення застосовують таку залежність:

$$S_{ij}^{n+1} = -\triangle t K_1 S_{ij}^{\ n} . \qquad (2.23)$$

Її отримали шляхом застосування методу Ейлера до третього рівняння (2.18).

Для побудови локально одновимірної схеми розв'язання рівняння (2.16) здійснимо такі перетворення. Спочатку запишемо це рівняння у вигляді

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}, \tag{2.24}$$

де t – фіктивний час.

Далі рівняння (2.24) розкладемо так [60]:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}, \tag{2.25}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}. \tag{2.26}$$

Рівняння (2.25) описує зміну величини P у напрямку осі X , а рівняння (2.25) – зміну в напрямку Y.

Розрахункові залежності (метод Річардсона) для визначення невідомого значення P на базі рівняння (2.25) мають вигляд [58]

$$P_{i,j}^{n+1} = P_{i,j}^{n} + \triangle t \frac{P_{i+1,j}^{n} - P_{i,j}^{n}}{\Delta x^2} + \triangle t \frac{-P_{i,j}^{n} + P_{i-1,j}^{n}}{\Delta x^2}. \tag{2.27}$$

Розрахункові залежності (метод Річардсона) для визначення невідомого значення P на базі рівняння (2.22) мають вигляд [58]

$$P_{i,j}^{n+1} = P_{i,j}^{n} + \triangle t \frac{P_{i,j+1}^{n} - P_{i,j}^{n}}{\Delta y^2} + \triangle t \frac{-P_{i,j}^{n} + P_{i,j-1}^{n}}{\Delta y^2}. \tag{2.28}$$

Оскільки ми розв'язуємо еволюційне рівняння, то розрахунок за залежностями (2.27), (2.28) завершується, коли виконується умова:

$$\left| P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n} \right| \le \mathrm{e}, \tag{2.29}$$

де n – номер ітерації; ε – мале число.

Швидкість течії розраховується так:

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

Для кодування різницевих рівнянь використовувався FORTRAN. Створено код *BIO-2K*. Для використання коду *BIO-2K* потрібно задати такі вхідні дані:

- концентрацію активного мулу, що потрапляє в біореактор, та її зміну з часом;

- концентрацію субстрату, що потрапляє в біореактор, та її зміну з часом;

- швидкість потоку на вході в біореактор;

- розміри біореактора;

- геометрічну форму біореактору;

- значення параметра K_1;

- значення коефіцієнта дифузії.

Код *BIO-2K* містить такі підпрограми:

- Підпрограма SLEM1 – розрахунок потенціалу швидкості в біореакторі;

Формальні параметри :

1.Масив потенціалу швидкості.

2. Розміри сітки.

3. Значення часового кроку.

4. Кількість часових кроків

5. Різніцевий крок $\triangle x$.

6. Різніцевий крок $\triangle y$.

7. Масив маркерів.

9. швидкість повітряного потоку на вході в розрахункову область

- Підпрограма SLEM2 – розрахунок поля швидкості в біореакторі.

Формальні параметри підпрограми:

1. Розміри розрахункової сітки.

2 .Масив потенціалу швидкості.

3. Масив абсолютного значення швидкості течії.

4. Масив поперечної компоненти швидкості течії.

5. Масив поздовжної компоненти швидкості течії.

6. Масив маркерів.

7. Розрахунковий крок $\triangle x$.

8. Розрахунковий крок $\triangle y$.

- Підпрограма SLEM3 – розрахунок поля концентрації субстрату в біореакторі.

Формальні параметри :

1.Масив концентрації субстрату.

2. Масив компоненти $u_{i,j}$ швидкості течії.

3. Масив компоненти $v_{i,j}$ швидкості течії.

4. Масив вертикальної компоненти швидкості потока.

5. Розміри розрахункової сітки.

6. Масив маркерів.

7. Розрахунковий крок $\triangle x$.

8. Розрахунковий крок $\triangle y$.

9 . Крок $\triangle t$.

10. Масив значень коефіцієнтів дифузії.

- Підпрограма SLEM4 – розрахунок зміни поля концентрації субстрату внаслідок його біологічної деструкції в реакторі.

Формальні параметри підпрограми:

1.Масив концентрації субстрату.

2. Розміри розрахункової сітки.

3. Масив маркерів.

4. Розрахунковий крок $\triangle x$.

5. Розрахунковий крок $\triangle y$.

6 . Крок $\triangle t$.

7. Коефіцієнт K_1 .

- Підпрограма SLEM5 – друк результатів моделювання.

Результатом роботи цього коду є поле концентрації субстрату в біореакторі та зміна концентрації субстрату з часом.

2.6 Тривимірна модель біологічного очищення води, яка враховує нерівномірність розподілу концентрації субстрату та активного мулу в споруді

На другому етапі досліджень була побудована тривимірна чисельна модель для оцінки ефективності роботи біореактора. Моделюючі рівняння моделі такі [113]:

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{\partial uS}{\partial x}+\frac{\partial vS}{\partial y}+\frac{\partial wS}{\partial z}=$$
$$=\frac{\partial}{\partial x}\left(\text{м}_x\frac{\partial S}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\text{м}_y\frac{\partial S}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\text{м}_z\frac{\partial S}{\partial z}\right), \qquad (2.30)$$

$$\frac{\partial X}{\partial t}+\frac{\partial uX}{\partial x}+\frac{\partial vX}{\partial y}+\frac{\partial wX}{\partial z}=$$
$$=\frac{\partial}{\partial x}\left(\text{м}_x\frac{\partial X}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\text{м}_y\frac{\partial X}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\text{м}_z\frac{\partial X}{\partial z}\right),$$

$$\frac{dX}{dt}=\mu X-K_dX,$$

$$\frac{dS}{dt}=-\frac{\text{м}}{Y}X,\ \mu=\mu_{\max}\cdot\frac{S}{S+K_s},$$

де K_d – коефіцієнт вимирання активного мулу; t – час; $X(x,y,z,t)$ – концентрація активного мулу в біореакторі; $S(x,y,z,t)$ – концентрація субстрату в біореакторі; $\mu_{x,y,z}(t)$ – параметр; $\mu_{\max}$ – параметр; Y – параметр; K_s – параметр; $u(x,y,z),v(x,y,z),w(x,y,z)$ – компоненти швидкості водного

потоку в біореакторі в напрямку осей x, y, z відповідно; μ_x, μ_y, μ_z – коефіцієнти дифузії відповідно в напрямку x, y, z .

Зауважимо, що коефіцієнти дифузії μ_x, μ_y, μ_z є різними величинами, але в науковій літературі існує суттєвий дефіцит даних щодо їх значень. Тому на практиці розрахунки здійснюються за умови $\mu_x = \mu_y = \mu_z$. Визначення цих параметрів експериментальним шляхом є дуже складним завданням.

Для практичного використання рівнянь моделі (2.30) необхідно розрахувати нерівномірне поле швидкості потоку в реакторі, тобто визначити параметри $u(x, y, z), v(x, y, z), w(x, y, z)$, під дією яких відбувається конвективний перенос субстрату та активного мулу в біореакторі. Для розрахунку нерівномірного поля швидкості потоку в біореакторі використовується 3D-рівняння для потенціалу швидкості [71]

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = 0, \qquad (2.31)$$

$$u = \frac{\partial P}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial P}{\partial y}\ w = \frac{\partial P}{\partial z}. \qquad (2.32)$$

Крайові та граничні умови для цих рівнянь такі самі, як для рівнянь (2.15) –(2.17).

Метод розв’язання рівнянь масопереносу із системи (2.30) розглянемо на прикладі лише рівняння переносу субстрату, тому що рівняння для переносу активного мулу має таку саму форму. Тривимірне рівняння для переносу субстрату із системи (2.30) розщеплюється на систему одновимірних рівнянь таким чином:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial uS}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\text{м}_x \frac{\partial S}{\partial x} \right),$$

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{\partial vS}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial y}\left(\text{м}_y\frac{\partial S}{\partial y}\right), \tag{2.33}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{\partial vS}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial z}\left(\mu_y\frac{\partial S}{\partial z}\right).$$

Рівняння системи (2.33) описують процес переносу субстрату в напрямках *X*, *Y* та *Z*.

Різницеві рівняння, що дають можливість розв'язати систему рівнянь (2.33), такі [71]:

- крок № 1 для першого рівняння:

$$S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}}=S_{i,j,k}^{n}-\triangle t\frac{u_{i+1,j,k}^{+}S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}}-u_{i,j,k}^{+}S_{i-1j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle x}+$$

$$+\triangle t\text{м}\frac{-S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}}+S_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle x^2}+\triangle t\text{м}\frac{-S_{i,j,k}^{n}+S_{i+1,j,k}^{n}}{\triangle x^2}, \tag{2.34}$$

- крок № 2 для першого рівняння:

$$S_{i,j,k}^{n+1}=S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}}-\triangle t\frac{u_{i+1,j,k}^{-}S_{i+1,j,k}^{n+1}-u_{i,j,k}^{-}S_{i,j,k}^{n+1}}{\triangle x}+$$

$$+\triangle t\text{м}\frac{-S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}}+S_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle x^2}+\triangle t\text{м}\frac{-S_{i,j,k}^{n+1}+S_{i+1,j,k}^{n+1}}{\triangle x^2}, \tag{2.35}$$

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

- крок № 1 для другого рівняння:

$$S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} = S_{i,j,k}^{n} - \triangle t \frac{v_{i,j+1,k}^{+} S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - v_{i,j,k}^{+} S_{i,j-1,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle y} +$$

$$+ \triangle t \text{м} \frac{-S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle y^2} + \triangle t \text{м} \frac{-S_{i,j,k}^{n} + S_{i+1,j,k}^{n}}{\triangle y^2}, \qquad (2.36)$$

- крок № 2 для другого рівняння:

$$S_{i,j,k}^{n+1} = S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - \triangle t \frac{v_{i,j+1,k}^{-} S_{i,j,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^{-} S_{i,j-1,k}^{n+1}}{\triangle y} +$$

$$+ \triangle t \text{м} \frac{-S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle y^2} + \triangle t \text{м} \frac{-S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i+1,j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle y^2}, \qquad (2.37)$$

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

- крок № 1 для третього рівняння:

$$S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} = S_{i,j,k}^{n} - \triangle t \frac{w_{i,j,k+1}^{+} S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - w_{i,j,k}^{+} S_{i,j,k-1}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle z} +$$

$$+ \triangle t \text{м} \frac{-S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i,j,k-1}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle z^2} + \triangle t \text{м} \frac{-S_{i,j,k}^{n} + S_{i,j,k+1}^{n}}{\triangle z^2}, \qquad (2.38)$$

- крок № 2 для третього рівняння:

$$S_{i,j,k}^{n+1} = S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - \triangle t \frac{w_{i,j,k+1}^{-} S_{i,j,k+1}^{n+1} - w_{i,j,k}^{-} S_{i,j,k}^{n+1}}{\triangle z} +$$

$$+ \triangle t \text{м} \frac{-S_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i,j,k-1}^{n+\frac{1}{2}}}{\triangle z^2} + \triangle t \text{м} \frac{-S_{i,j,k}^{n+1} + S_{i,j,k+1}^{n+1}}{\triangle z^2}, \qquad (2.39)$$

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

За аналогічною скінченно-різницевою схемою розв'язуємо рівняння переносу активного мулу із системи (2.30). Після розв'язання рівнянь переносу для X та S у кожній різницевій комірці розв'язуємо рівняння з моделі Monod за допомогою методу Ейлера [60]. Тобто визначаємо нові значення концентрації субстрату та активного мулу, внаслідок їх біологічної взаємодії. Різницеві вирази мають вигляд

$$S_{i,j,k}^{n+1} = S_{i,j,k}^{n} - dt \cdot \frac{\mu^{n}_{i,j,k}}{Y} X_{i,j,k}^{n},$$

$$X_{i,j,k}^{n+1} = X_{i,j,k}^{n} - dt \cdot \mu^{n}_{i,j,k} X_{i,j,k}^{n} - K_d X^{n}_{i,j,k},$$

$$\mu^{n}_{i,j,k} = \mu_{\max} \cdot \frac{S^{n}_{i,j,k}}{S^{n}_{i,j,k} + K_s}.$$

Далі, на новому часовому кроці, повторюють розрахунок зміни концентрації субстрату та активного мулу в кожній різницевій комірці внаслідок їх руху, дифузії та біологічної взаємодії.

Для побудови локально одновимірної схеми розв'язання рівняння (2.31) виконаємо такі перетворення. Спочатку запишемо це рівняння у вигляді

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2}, \tag{2.40}$$

де t – фіктивний час.

Далі рівняння (2.40) розкладемо так:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}, \tag{2.41}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}, \tag{2.42}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial z^2}. \qquad (2.43)$$

Розрахункові залежності (метод Річардсона) для визначення невідомого значення P на базі рівняння (2.41) мають вигляд [58]

$$P_{i,j,k}^{n+1} = P_{i,j,k}^{n} + \triangle t \frac{P_{i+1,j,k}^{n} - P_{i,j,k}^{n}}{\Delta x^2} + \triangle t \frac{-P_{i,j,k}^{n} + P_{i-1,j,k}^{n}}{\Delta x^2}. \qquad (2.44)$$

Розрахункові залежності для визначення невідомого значення P на базі рівняння (2.42) мають вигляд [58]

$$P_{i,j,k}^{n+1} = P_{i,j,k}^{n} + \triangle t \frac{P_{i,j+1,k}^{n} - P_{i,j,k}^{n}}{\Delta y^2} + \triangle t \frac{-P_{i,j,k}^{n} + P_{i-1,j,k}^{n}}{\Delta y^2}. \qquad (2.45)$$

Розрахункові залежності для визначення невідомого значення P на базі рівняння (2.43) мають вигляд [58]

$$P_{i,j,k}^{n+1} = P_{i,j,k}^{n} + \triangle t \frac{P_{i,j,k+1}^{n} - P_{i,j,k}^{n}}{\Delta z^2} + \triangle t \frac{-P_{i,j,k}^{n} + P_{i,j,k-1}^{n}}{\Delta z^2}. \qquad (2.46)$$

Розрахунок за цими залежностями завершується, коли виконується умова

$$\left| P_{i,j,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n} \right| \le \mathrm{e}, \qquad (2.47)$$

де n – номер ітерації; ε – мале число.

На наступному етапі визначаємо швидкість течії

$$u = \frac{P_{i+1,j,k} - P_{i,j,k}}{\Delta x} \; v = \frac{P_{i,j+1,k} - P_{i,j,k}}{\Delta y} \; w = \frac{P_{i,j,k+1} - P_{i,j,k}}{\Delta z}.$$

Для кодування різницевих рівнянь використовувався FORTRAN. Створено код *BIO-3K*. Для його використання потрібно задати такі вхідні дані:

- концентрацію субстрату, що потрапляє в біореактор та її зміну із часом;

- концентрацію та витрату активного мулу, що потрапляє в біореактор та її зміну із часом;

- розміри біореактора, його геометричну форму;

- значення параметрів моделі Monod;

- витрату стічних вод;

- значення коефіцієнтів дифузії.

Код *BIO-3K* містить такі підпрограми:

SLE3 – розрахунок потенціалу швидкості в біореакторі;

SLE3 – розрахунок поля швидкості в біореакторі;

SLM33 – розрахунок поля концентрації субстрату в біореакторі та його зміна із часом.

SLM33 – розрахунок поля концентрації активного мулу в біореакторі та його зміна із часом.

SLM33 – розрахунок зміни концентрації субстрату та активного мулу в біореакторі згідно із залежностями моделі Monod;

SLEM5 – друк результатів моделювання.

Результатом роботи цього коду є поля концентрації субстрату та активного мулу в біореакторі та зміна цих полів із часом.

2.7 Двовимірна модель біологічного очищення води, що враховує нерівномірність розподілу концентрації субстрату та активного мулу в споруді

На наступному етапі досліджень для виконання пілотних розрахунків була розроблена двовимірна модель роботи біоректора, яка дозволяла розраховувати такі важливі процеси, що наявні в споруді для біологічного очищення води:

– гідродинаміку течії в біореакторі;

– масоперенос субстрату

– масоперенос активного мулу;

– біологічне очищення на базі моделі Monod .

Оскільки процес очищення в біореакторі є багатофакторним, то для його математичного моделювання здійснимо фізичне розщеплення процесу на три основних етапи:

1. Перенос активного мулу в споруді.

2. Перенос субстрату в споруді.

3. Процес біологічного очищення.

Базовими рівняннями моделі в рамках цих етапів є такі [113]:

$$\frac{\partial X}{\partial t}+\frac{\partial uX}{\partial x}+\frac{\partial vX}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\text{м}_x\frac{\partial X}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\text{м}_y\frac{\partial X}{\partial y}\right)+$$

$$+\sum_{i=1}^{N}Q\ \text{д}(x-x_i)\text{д}(y-y_i), \qquad (2.49)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{\partial uS}{\partial x}+\frac{\partial vS}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\text{м}_x\frac{\partial S}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\text{м}_y\frac{\partial S}{\partial y}\right)+$$

$$+\sum_{j=1}^{M}Q_s\text{д}(x-x_j)\text{д}(y-y_j), \qquad (2.50)$$

$$\frac{dX}{dt}=\mu\ X-K_dX\ , \qquad (2.51)$$

$$\frac{dS}{dt}=-\frac{\text{м}}{Y}X\ , \qquad (2.52)$$

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

де K_d – коефіцієнт вимирання активного мулу; t – час; X – осереднена концентрація активного мулу в біореакторі; S – осереднена концентрація субстрату в біореакторі; μ – параметр; Y – параметр; u,v – компоненти швидкості водного потоку в біореакторі в напрямку осей X,Y відповідно; $\mu=(\mu_x,\mu_y)$ – коефіцієнти дифузії відповідно у напрямку осей X,Y.

Осереднення концентрацій активного мулу та субстрату по глибині H біореактора (рис.2.2) виконується так:

$$X(x,y)=\frac{1}{H}\int X(x,y,z)dz, \qquad (2.53)$$

$$S(x,y)=\frac{1}{H}\int S(x,y,z)dz. \qquad (2.54)$$

Якщо осереднення здійснюється за формулами (2.53), (2.54), то ми маємо планову модель розрахунку біореактора. Якщо осереднення здійснюється по ширині B біореактора, то ми маємо профільну модель.

Граничні умови для моделюючих рівнянь такі:

1. На вхідному отворі граничною умовою є $S=S_{in}, \mathrm{X}=\mathrm{X}_{in}$, де S_{in}, X_{in} – відомі концентрації субстрату та мулу відповідно.

2. На виході з біореактора у чисельної моделі гранична умова така:

$$S(i+1,j)=S(i,j),$$

$$X(i+1,j)=X(i,j),$$

де $S(i+1,j), X(i+1,j)$ – концентрації в останній обчислювальній комірці; $S(i,j)$ $X(i,j)$ – концентрації в попередній обчислювальній комірці.

3. На твердих поверхнях

$$\frac{\partial X}{\partial n}=0,$$

$$\frac{\partial S}{\partial n}=0,$$

де n – одинична нормаль до поверхні.

Початкові умови мають вигляд при $t=0$: $X=X_0$, $S=S_0$.

Для розв’язання задачі гідродинаміки – визначення поля компонент вектора швидкості течії в біореакторі використовується модель потенціального руху [28, 47, 48, 71]

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 P}{\partial y^2}=0,$$

де P – потенціал швидкості.

Знаючи поле потенціалу, значення компонент вектора швидкості потоку в біореакторі визначається за формулами [48, 71]:

$$u = \frac{\partial P}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial P}{\partial y}.$$

Чисельний розв’язок моделюючих рівнянь знаходимо за допомогою різницевих залежностей (2.12) , (2.13), (2.19) – (2.22), (2.27). Для виконання обчислювального експерименту на базі запропонованої моделі створено код *SMOLe.for*. Структура коду:

Підпрограма *SLEM8* – розрахунок потенціалу швидкості в біореакторі.

Підпрограма *SLEM7* – розрахунок поля швидкості в біореакторі.

Підпрограма *SLE23* – розрахунок поля концентрації субстрату в біореакторі.

Підрограма *SLE14* – розрахунок поля концентрації активного мулу в біореакторі.

Підрограма *SLE54* – розрахунок зміни концентрації активного мулу та субстрату в біореакторі внаслідок взаємодії згідно з моделлю Monod.

SLEM5 – друк результатів моделювання.

Результатом роботи цього коду є поля концентрації активного мулу та субстрату в біореакторі та зміна цих полів із часом.

Висновки до розділу 2

1. Запропоновано дві балансові моделі для розрахунку біореактора, що дають можливість розраховувати процес біологічного очищення стічних вод з урахуванням зміни із часом витрати стічних вод, що потрапляють у реактор, та вхідної концентрації субстрату, а також з урахуванням зміни із часом витрати активного мулу, що потрапляє в реактор, та його концентрації.

2. Запропоновано двовимірну математичну модель роботи біологічного реактора, що враховує гідродинаміку потоку стічних вод у ньому. Для моделювання процесу біологічного очищення використовується рівняння

першого рівня. Модель може бути застосована для виконання пілотних розрахунків реактора з метою визначення його ефективності.

3. Запропоновано двовимірну математичну модель для оцінювання ефективності роботи біологічного реактора, що базується на рівняннях Monod, рівняннях масопереносу для субстрату та активного мулу. Особливістю моделі є врахування гідродинаміки течії в реакторі, що дає можливість розраховувати процес біологічного очищення стічних вод при зміні концентрації субстрату та активного мулу в різних частинах реактора.

4. Запропоновано тривимірну математичну модель роботи біологічного реактора, що базується на рівняннях Monod, рівняннях масопереносу для субстрату та активного мулу. Модель дає можливість розраховувати роботу біологічного реактора з урахуванням нерівномірного поля течії в споруді.

5. Для «роботи» запропонованих математичних моделей біореакторів використовується типова вхідна інформація, що є важливим для практичного застосування моделей.

6. Багатовимірні моделі, запропоновані для розрахунку біореакторів, дають можливість отримувати концентраційні поля активного мулу та субстрату в реакторі та за допомогою цієї інформації аналізувати, як здійснюється процес біологічного очищення в різних частинах реактора.

РОЗДІЛ 3
МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ОЧИЩЕННЯ ВОДИ В СПОРУДАХ З РУХОМИМ БІОЦЕНОЗОМ

У розділі розглянуто математичні моделі, розроблені для теоретичного аналізу роботи біореактора, де використовується рухомий біоценоз.

3.1 Квазідинамічна модель біологічного очищення води в аеротенку в разі використання рухомого біоценозу

Як відомо, одним із сучасних напрямів наукових досліджень є визначення впливу рухомого біоценозу (рис.3.1, 3.2) на підвищення ефективності очищення стічних вод в біореакторах (за кордоном ці біореактори мають скорочену назву - *MMBR*). Для виконання такого аналізу потрібно мати спеціалізовані математичні моделі. Оскільки процес біологічного очищення стічних вод у біореакторах є багатофакторним та дуже складним, то найбільш ефективним методом дослідження є метод чисельного моделювання. Цей метод дозволяє здійснювати теоретичне дослідження роботи біореактора з урахуванням багатьох факторів. Але використання цього методу потребує значної кількості експериментальної інформації щодо вхідних параметрів (константи швидкості формування біоплівки, швидкості відриву біоплівки від носія та ін.). Це є перешкодою для широкого використання багатофакторних чисельних моделей, адже існуючі експериментальні дані щодо тих чи інших констант є розрізненими, а в деяких випадках вони взагалі відсутні. Тому на практиці важливо розробляти чисельні моделі, що можуть використовувати існуючу базу експериментальних параметрів, які визначають процес біологічної деструкції субстрату.

Процес біологічної деструкції в реакторах з рухомим біоценозом наявний як на носіях, так і в інших частинах реактора, де є активний мул.

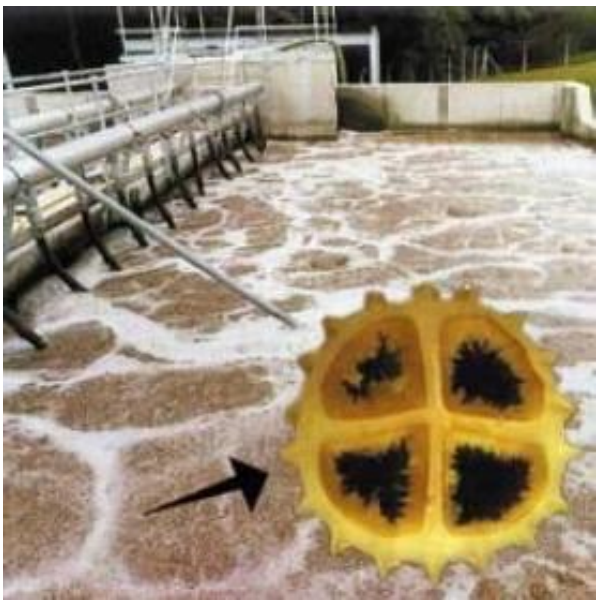


Рисунок 3.1 – Біореактор з рухомими носіями [94]

Біологічна плівка формується на спеціальному завантаженні – носіях (cariers), що розташовані всередині очисної споруди. Вигляд цього завантаження може бути різноманітним (рис.3.2, 3.3).

Рисунок 3.2 – Блоки із завантаженням з рухомих носіїв(random packed medium) [97] (http//www. wateronline.com)

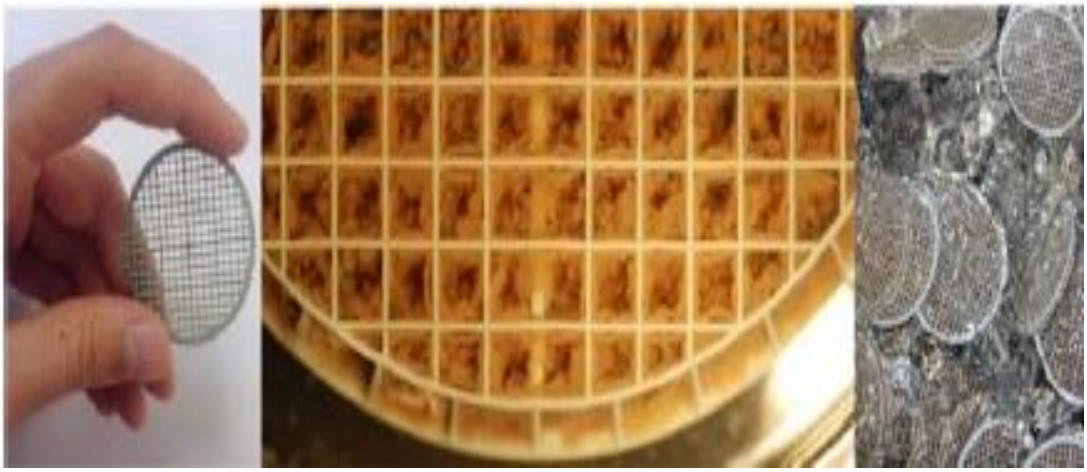


Рисунок 3.3 Вигляд носія для рухомого біоценозу (carrier) [76]

На поверхні рухомих носіїв формується біоплівка (рис.3.4, 3.5) [109], де відбувається деструкція субстрату. Товщина біоплівки може бути різною, порядка 150 – 350 $\mu м$.

Рисунок 3.4 – Біоплівка на поверхні рухомого носія [109]

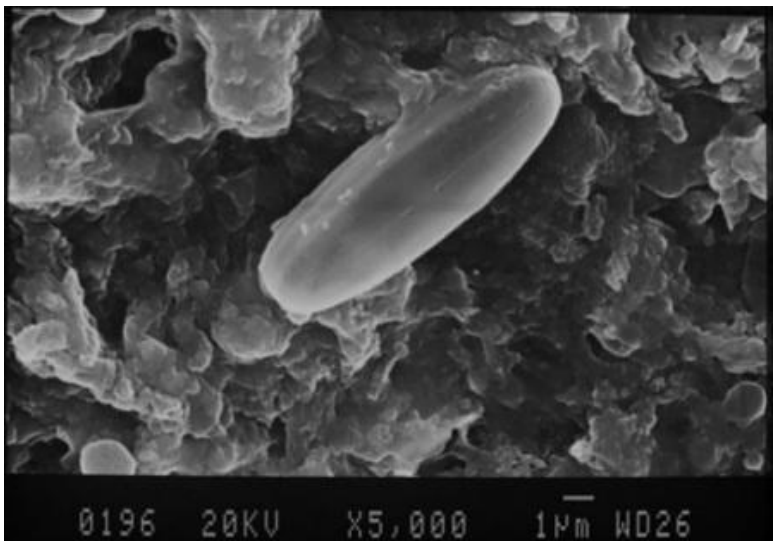
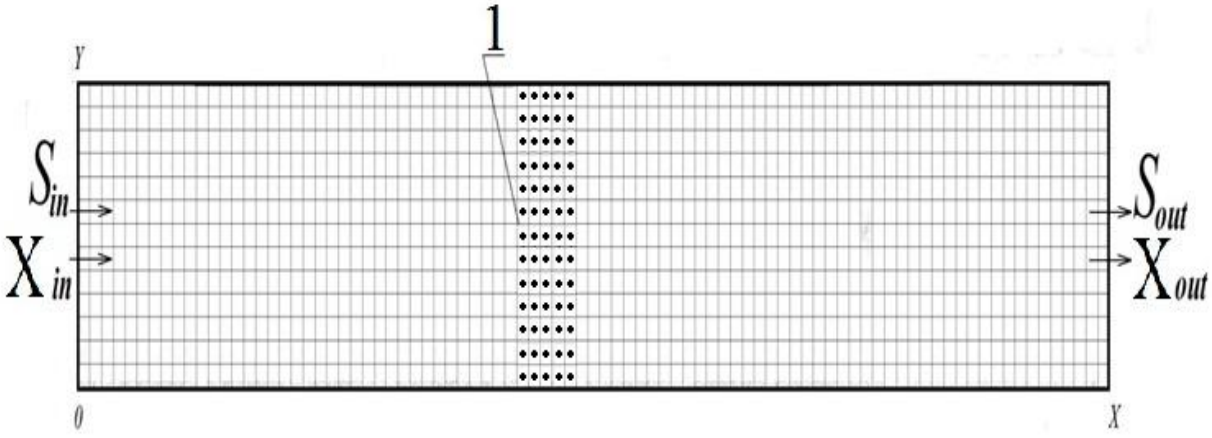


Рисунок 3.5 – Біоплівка, що сформувалася на рухомому носії [109]

Колонії мікроорганізмів у біоплівці дуже різноманітні. Це є додатковим фактором збільшення ефективності очищення стічних вод за допомогою рухомих носіїв, поряд з фактором збільшення площі контакту стічних вод з біоплівкою.

Розглянемо побудову математичних моделей для розрахунку процесу біологічного очищення стічних вод у біореакторі з рухомим завантаженням. На рис. 3.6 схематично показана область моделювання.



1 – область, де розташований рухомий біоценоз

Рисунок 3.6 – Схема розрахункової області

На рис.3.6 показано дві зони в біореакторі: зона, де є рухомі носії, та зона, де їх немає. Також наголосимо, що запропоновані моделі дозволяють досліджувати процес біологічного очищення води в спорудах будь-якої геометричної форми (наприклад, такої, як схематично показана на рис. 3.7).

Зауважимо, що тут ми розглядаємо модель, коли враховується рух у реакторі субстрату, активного мулу, але самі носії не рухаються. Вони розташовані в окремій зоні, де наявна активна деструкція субстрату.

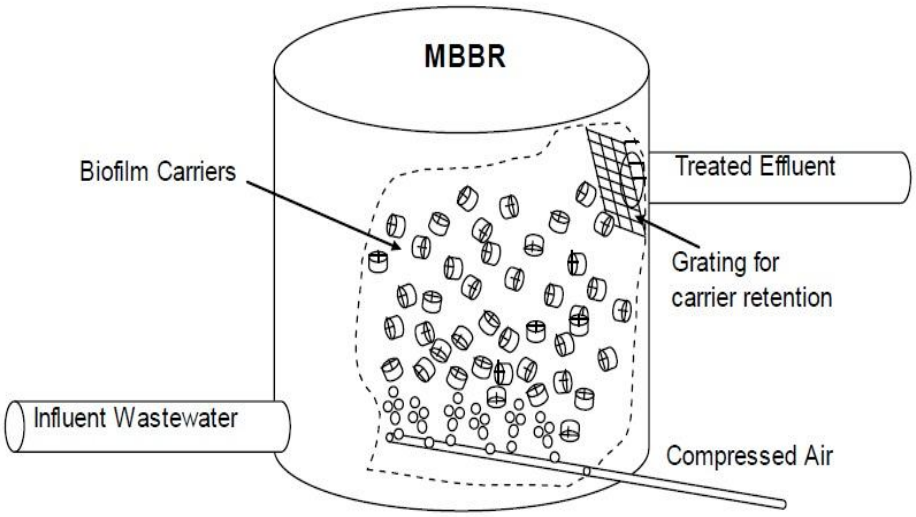


Рисунок 3.7 – Схема роботи біореактора з рухомим завантаженням [91]

Пропонуються дві моделі для оцінки ефективності роботи біологічного реактора, де використовуються рухомі носії біоценозу.

Перша модель. Моделюючі рівняння запропонованої моделі можна поділити на такі групи:

1-ша група: рівняння для розрахунку біологічного очищення стічних вод у тій частині споруди, де нема рухомого біоценозу. У цій області використовуються такі моделюючі рівняння [113]:

$$\frac{\partial X}{\partial t}+\frac{\partial uX}{\partial x}+\frac{\partial vX}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\text{м}_x\frac{\partial X}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\text{м}_y\frac{\partial X}{\partial y}\right)+ \quad . \tag{3.1}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{\partial uS}{\partial x}+\frac{\partial vS}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\text{м}_x\frac{\partial S}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\text{м}_y\frac{\partial S}{\partial y}\right), \tag{3.2}$$

$$\frac{dX}{dt}=\mu\ X-K_d X\ , \tag{3.3}$$

$$\frac{dS}{dt}=-\frac{\text{м}}{Y}X\ , \tag{3.4}$$

$$\mu=\mu_{\max}\cdot\frac{S}{S+K_s}.$$

Пояснення щодо параметрів моделі (3.1) – (3.4) подані в розділі 2.

2-га група: рівняння для розрахунку біологічного очищення води в тій частині споруди, де є рухомий біоценоз (рис. 3.3, позиція 1).

Розрахунок процесу деструкції субстрату в зоні, де розташовані рухомі носії, здійснюється трьома етапами. По-перше, на базі моделі Harremoes, визначається параметр *r* [99. 119]:

$$r=k_a\cdot(S)^n, \tag{3.5}$$

де параметр k_a – визначається експериментально (наприклад, *n*=0,57); *S* – концентрація субстрату, г/м^3.

По-друге, розраховується швидкість «споживання» субстрату r_r [г/(м^{3}год)] у біоплівці на базі емпіричної моделі [99, 119]

$$r_r=r\cdot w, \tag{3.6}$$

де *w* – активна площа поверхні носіїв.

Наголосимо, що, наприклад, для рухомого носія, що наведений на рис. 3.2, його площа дорівнює $6.8\cdot10^{-3}$ м^2, активна площа цих носіїв становить 900 м^2/м^3[76].

На третьому етапі визначається зміна концентрації субстрату в зоні, де розташовані носії біоценозу, за рахунок конвективного руху, дифузії

субстрату в потоці та його деструкції в біоплівці на носіях. Для опису цих процесів використовуються такі рівняння:

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{\partial uS}{\partial x}+\frac{\partial vS}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\text{м}_x\frac{\partial S}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\text{м}_y\frac{\partial S}{\partial y}\right) \qquad (3.7)$$

та

$$\frac{\partial S}{\partial t}=-r\cdot$$

Таким чином, для використання запропонованої моделі потрібно знати кількість рухомих носіїв у контрольному об'ємі та визначити параметр r на базі інформації про активну площу поверхні взаємодії та $k_{a.}$.

Для розрахунку поля швидкості потоку стічних вод у біореакторі (як у зоні, де є рухомі носії біоплівки, так і в зоні, де їх немає) використовується рівняння для потенціалу швидкості [71]

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 P}{\partial y^2}=0\,, \qquad (3.8)$$

$$u=\frac{\partial P}{\partial x},\quad v=\frac{\partial P}{\partial y}\,. \qquad (3.9)$$

Постановка крайових умов для моделюючих рівнянь розглянута в розд. 2.

Таким чином, у рамках запропонованої моделі процес біологічного очищення в реакторі відбувався у двох зонах: у зоні, де є рухомі носії та в зоні, де їх нема. Рух стічних вод крізь носії в цій моделі здійснюється без врахування гідродинамічного впливу течії на носії. Тобто носії не рухаються, а крізь них наявна течія стічних вод та процес біологічного очищення [80, 113]. Тому цю модель будемо називати квазідинамічною.

Для виконання розрахунків потрібно задати чисельність рухомих носіїв в реакторі, площу активної поверхні, що використовується в процесі біологічного очищення. Також необхідні дані щодо констант, які визначають швидкість процесу біологічного очищення води [80, 113] .

3.2 Модель біологічного очищення води в аеротенку з урахуванням руху носіїв біоценозу в реакторі

Розглянемо тепер підхід для моделювання руху носіїв біоценозу в реакторі. По-перше, наголосимо, що процес руху носіїв у реакторі є хаотичним та дуже складним з позиції механіки: наявна взаємодія носіїв одного з іншим, вплив потоку води на носії, вплив бульбашок повітря на рух носіїв. Урахувати всі види взаємодії в математичній моделі неможливо. Тому при побудові математичної моделі потрібно робити припущення й дуже суттєві.

З позиції теорії масопереносу кожен рухомий носій біоплівки можна розглядати як тверду домішку, яка рухається хаотично в реакторі. Приймемо, що рух носіїв не впливає на гідродинаміку потоку стічних вод у реакторі. Оскільки рух носіїв біоплівки є хаотичним, то для його опису в реакторі будемо використовувати такий підхід [60]: хаотичний рух субстанції моделює друга похідна від концентрації цієї субстанції. Тоді процес хаотичного руху носіїв біоплівки будемо моделювати таким рівнянням:

$$\frac{\partial C_a}{\partial t} = м_c \frac{\partial^2 C_a}{\partial x^2} + м_c \frac{\partial^2 C_a}{\partial y^2}. \qquad (3.10)$$

де t – час; $м_c$ – коефіцієнт дифузії; C_a – концентрація рухомих носіїв.

Розглянемо граничні умови для моделюючого рівняння:

- на твердих поверхнях реактора: $\frac{\partial C_a}{\partial n} = 0$, де n – одиничний вектор зовнішньої нормалі до твердої стінки;

- на нижній сітці, де потік надходить у зону з носіями: $C_a = 0$;

- на границі витоку крізь сітку: $C_a = C_m$, де C_m – максимальна можлива концентрація рухомих носіїв у об'ємі води.

Початкова умова: при t=0 $C_a = C_{00}$, де C_{00} – відома концентрація рухомих носіїв у реакторі.

Таким чином, модель (3.10) є дифузійною моделлю руху носіїв біоценозу в реакторі. Моделюючи процес руху носіїв біоценозу на базі рівняння (3.10), будемо вважати, що носії не залишають зону розташування. На практиці це досягається тим, що по границях зони розташовуються сітки, що не дають можливості носіям з неї вийти.

Таким чином, зміна концентрації рухомих носіїв у різних точках реактора визначається шляхом розв'язання рівняння дифузії (3.10). Оскільки концентрація носіїв у різних точках реактора змінюється із часом *t*, то буде змінюватися ефективність очищення води в різних частинах реактора.

Алгоритм розв'язання задачі з оцінки ефективності роботи реактора з рухомими носіями такий:

1. Розв'язується задача гідродинаміки шляхом визначення поля потенціалу швидкості. Для цього використовується рівняння (3.8).

2. Визначається поле швидкості потоку стічних вод у реакторі. Для цього використовуються залежності (3.9).

3. Визначається поле концентрації субстрату в реакторі з урахуванням швидкості потоку та дифузії на момент часу *t*.

4. Визначається поле концентрації активного мулу в реакторі з урахуванням швидкості потоку та дифузії на момент часу *t*.

5. Розраховується процес деструкції субстрату в зоні, де немає рухомих носіїв на момент часу *t*. Для цього використовуються залежності Monod.

6. Розраховується процес руху носіїв у реакторі на момент часу *t*. Для цього використовуються рівняння (3.10).

7. На основі поля розподілу рухомих носіїв біоценозу в реакторі на момент часу *t* розраховуються параметри, що визначаються залежностями (3.5), (3.6).

8. Розраховується процес руху та деструкції субстрату в зоні, де є рухомі носії біоценозу на момент часу t. Для цього використовуються рівняння (3.7).

9. Розрахунок повторюється, починаючи з п. 3, для визначення нових значень параметрів у реакторі, для нового моменту часу.

3.3 Чисельне розв'язання моделюючих рівнянь

Розглянемо чисельне розв'язання моделюючих рівнянь, що наведені в п. 3.2. Розрахунок здійснюється на прямокутній різницевій сітці. Потенціал швидкості, концентрація активного мулу, концентрація субстрату, концентрація рухомих носіїв визначається всередині різницевих комірок. Компоненти швидкості потоку розраховуються на сторонах різницевих комірок.

Для виконання розрахунків рівняння для потенціалу швидкості запишемо так:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}, \qquad (3.14)$$

де t – фіктивний час. Далі розв'яжемо рівняння (3.14) за допомогою умовно апроксимуючої схеми [60]. Розв'язок має вигляд:

- на першому кроці розщеплення [60]:

$$\frac{P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - P_{i,j}^{n}}{\Delta t} = \left[\frac{-P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + P_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2} \right] + \left[\frac{-P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + P_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y^2} \right], \qquad (3.15)$$

- на другому кроці розщеплення [60]:

$$\frac{P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} = \left[\frac{P_{i+1,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta x^2} \right] + \left[\frac{P_{i,j+1}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta y^2} \right]. \qquad (3.16)$$

Розрахунок закінчується, коли виконується умова

$$\left| P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n} \right| \le \varepsilon,$$

де ε – мале число. Для початку розрахунку приймаємо $t = 0$, P=0.

У дискретному вигляді швидкість течії визначається так:

$$u_{ij} = \frac{P_{i,j} - P_{i-1,j}}{\Delta x},$$

$$v_{ij} = \frac{P_{i,j} - P_{i,j-1}}{\Delta y}.$$

Для розв'язання рівняння (3.13) використовується метод Річардсона. Розрахункова залежність для визначення невідомого значення концентрації рухомих носіїв *C* має вигляд [58]

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^{n} + \Delta t \frac{C_{i+1,j}^{n} - 2C_{i,j}^{n} + C_{i,j}^{n}}{\Delta x^2} + \Delta t \frac{C_{i,\mathrm{j}+1}^{n} - 2C_{i,j}^{n} + C_{i,j-1}^{n}}{\Delta y^2}.$$

Ця розрахункова формула – явна залежність, що дозволяє легко розрахувати зміну концентрації рухомих носіїв у реакторі з часом.

Розглянемо метод розв'язання моделюючих рівнянь (3.8), (3.9). Це рівняння е однотипними, тому викладемо метод розв'язання для загального рівняння переносу вигляду

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\text{м}_x \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\text{м}_y \frac{\partial C}{\partial y}\right), \qquad (3.17)$$

де *C* стосується концентрації активного мулу або субстрату.

Розкладемо це рівняння на два рівняння так [49]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\text{м}\frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\text{м}\frac{\partial C}{\partial y}\right). \qquad (3.18)$$

Для розв'язання першого із системи (3.18) зробимо такі апроксимації та перетворення [71]

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

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

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

$$\frac{\partial u^{-}C}{\partial x} \approx \frac{u^{-}_{i+1,j}C^{n+1}_{i+1,j} - u^{-}_{i,j}C^{n+1}_{i,j}}{\Delta x} = L^{-}_{x}C^{n+1},$$

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

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

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

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

Далі виконаємо таке розкладання [71]:

- перший крок, k=1/4:

$$\frac{C^{n+k}_{ij} - C^{n}_{ij}}{\Delta t} + \frac{1}{2}\left(L^{+}_{x}C^{k} + L^{+}_{y}C^{k}\right) = 0;$$

- другий крок, k=1/2,c=n+1/4:

$$\frac{C^{k}_{ij} - C^{c}_{ij}}{\Delta t} + \frac{1}{2}\left(L^{-}_{x}C^{k} + L^{-}_{y}C^{k}\right) = 0,$$

- третій крок, k=n+3/4, c=n+1/2:

$$\frac{C^{k}_{ij} - C^{c}_{ij}}{\Delta t} + \frac{1}{2}\left(L^{-}_{x}C^{k} + L^{-}_{y}C^{k}\right) = 0,$$

- четвертий крок, k=n+1, c=n+3/4:

$$\frac{C_{ij}^{k}-C_{ij}^{c}}{\Delta t}+\frac{1}{2}\ L_x^{+}C^{k}+L_y^{+}C^{k}\ =0.$$

Для визначення невідомого значення концентрації C на кожному кроці розкладання використовується явна формула «рухомого розрахунку».

Для чисельного розв'язання другого рівняння із системи (3.18) використовуємо таку двокрокову схему розкладання [60]:

- на першому кроці розкладання різницеве рівняння має вигляд

$$\frac{C_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}-C_{i,j}^{n}}{\Delta t}=\left[\mu_x\frac{-C_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}+C_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2}\right]+\left[\mu_y\frac{-C_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}+C_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y^2}\right],\qquad(3.15)$$

- на другому кроці розкладання різницеве рівняння має вигляд

$$\frac{C_{i,j}^{n+1}-C_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t}=\left[\mu_x\frac{C_{i+1,j}^{n+1}-C_{i,j}^{n+1}}{\Delta x^2}\right]+\left[\mu_y\frac{C_{i,j+1}^{n+1}-C_{i,j}^{n+1}}{\Delta y^2}\right].\qquad(3.16)$$

Визначення невідомого значення концентрації C на кожному кроці розкладання виконується за явною формулою «рухомого розрахунку».

Для чисельного розв'язання рівнянь (3.1), (3.4), (3.6), (3.7) використовується метод Ейлера [60]. Наприклад, для рівняння (3.4) розрахункова залежність за методом Ейлера має вигляд

$$S^{n+1}=S^{n}-r\cdot dt.$$

Розв'язання рівнянь Monod за методом Ейлера наведено в розділі 2.

Алгоритм розв'язання задачі з визначення ефективності роботи біореактора з рухомим біоценозом на базі побудованих моделей такий:

1. Формується блок початкових даних, що необхідні для розрахунку (у файл початкових даних вноситься інформація про розміри біореактора, його

геометричну форму, концентрацію субстрату у воді, що потрапляє в реактор, тощо).

2. Здійснюється розрахунок гідродинаміки течії в реакторі та визначається поле швидкості потоку стічних вод в очисній споруді.

3. На часовому кроці *dt* здійснюється розрахунок поширення субстрату в реакторі.

4. На часовому кроці *dt* здійснюється розрахунок поширення активного мулу в реакторі.

5. На часовому кроці *dt* здійснюється розрахунок процесу «споживання» субстрату в реакторі.

5[a]. Якщо використовується субмодель розрахунку руху носіїв біоплівки, то здійснюється такий розрахунок на базі моделі (3.13), на часовому кроці *dt.*

6.Здійснюється друк параметрів, що розраховані впродовж часового кроку *dt.*

7. Розрахунок повторюється, починаючи з кроку 3.

Для кодування різницевих рівнянь побудованої чисельної моделі використовувався FORTRAN. Створено код *BIO-2KR*. Для застосування коду *BIO-2KR* потрібно задати таки вхідні дані:

- концентрацію субстрату, що потрапляє в біореактор, та її зміну з часом;

- розміри біореактора, його геометричну форму;

- значення параметра K_1;

- витрату стічних вод;

- значення коефіцієнтів дифузії.

Код *BIO-2KR* містить такі підпрограми:

SLER3 – розрахунок потенціалу швидкості в реакторі.

SLER3 – розрахунок поля швидкості в реакторі.

SLER3 – розрахунок поля концентрації субстрату в реакторі та його зміна з часом.

SLER8 – розрахунок поля концентрації субстрату в біореакторі та його зміна з часом.

SLER9 – розрахунок поля концентрації рухомих носіїв в біореакторі та його зміна з часом.

SLR91 – розрахунок споживання субстрату активним мулом.

SLER – друк результатів моделювання.

Результатом роботи цього коду є поле концентрації субстрату, активного мулу та концентрації рухомих носіїв у реакторі.

Висновки до розділу 3

1. Для розрахунку руху субстрату та активного мулу в біореакторі з рухомими носіями біоценозу запропоновано використання моделі потенціального руху – фундаментальної моделі гідродинаміки. Це дозволяє оперативно визначати поле швидкості потоку стічних вод у реакторі.

2. Для комп'ютерного моделювання очищення води в реакторах з рухомим біоценозом запропоновано двовимірну квазідинамічну модель. Модель дозволяє розрахувати процес очищення лише на базі інформації про активну площу рухомих носіїв біоценозу, у зоні розташування носіїв. Ця модель враховує рух субстрату та активного мулу в біореакторі.

3. Запропоновано двовимірну динамічну математичну модель для розрахунку процесу біологічного очищення води в реакторах, яка враховує не тільки рух субстрату та активного мулу в споруді, а також рух носіїв з біологічною плівкою. Модель базується на чисельному розв'язанні рівняння дифузії для носіїв біоценозу.

4. Для комп'ютерного моделювання процесу очищення води в біореакторах з рухомим біоценозом на базі запропонованих математичних моделей використовується типова вхідна інформація, що є важливим для практичного застосування моделей.

РОЗДІЛ 4
ДОСЛІДЖЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ОЧИЩЕННЯ ВОДИ В БІОРЕКТОРАХ, ВИКОНАНЕ МЕТОДОМ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

У цьому розділі розглядається практичне використання побудованих моделей біологічного очищення води в біореакторах класичного типу, у реакторах з додатковими елементами, у реакторах з локальним впорскуванням активного мулу та в реакторах з рухомим біоценозом. Дослідження нестаціонарних процесів біологічного очищення стічних вод виконано методом комп'ютерного моделювання.

4.1 Практичне використання балансових моделей для оцінки ефективності роботи біоректора

Розглянемо практичне використання побудованої балансової (камерної) чисельної моделі (2.5), (2.14) для оцінювання ефективності роботи класичного біоректора (реактор, що має форму басейна, куди зі стічними водами потрапляє активний мул та субстрат). Ефективність роботи оцінюється за величиною субстрату на виході з реактора. Нижче наведено результати розрахунку зміни концентрації субстрату на виході з аеротенка за таких вхідних даних [44]:

$S_{in} = 140$ мг/л – концентрація субстрату ($БПК_{пов}$), що потрапляє в споруду;

W =12388 м^3 – об'єм аеротенка;

$Q_s(t)$ = 48500 м^3/д – витрата стічних вод;

K_1 =32 (1/д) – коефіцієнт швидкості деструкції субстрату в реакторі.

Початкова умова: $S_{in} = 140$ мг/л – концентрація субстрату в реакторі для моменту часу t=0.

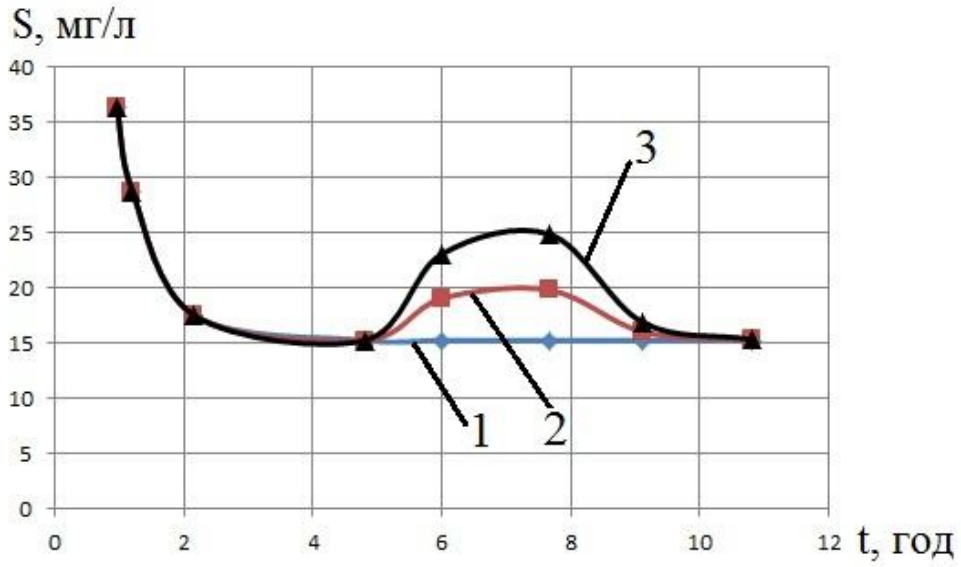
Розглядалося три сценарії:

- сценарій № 1: спостерігається рівномірна подача стічних вод у реактор;

- сценарій № 2: спостерігається рівномірна подача стічних вод у реактор, але на інтервалі 5 год – 8 год збільшується на 30 % концентрація субстрату в стічних водах (аварійна ситуація);

- сценарій № 3: спостерігається рівномірна подача стічних вод у реактор, але на інтервалі 5 год – 8 год збільшується на 30 % концентрація субстрату в стічних водах та на 30 % витрата стічних вод (аварійна ситуація).

На рис. 4.1 показано, як змінюється концентрація субстрату на виході з реактора для сценаріїв, що розглядаються.



1 – рівномірна подача субстрату в реактор, сценарій № 1;

2 – сценарій № 2; 3 – сценарій № 3

Рисунок 4.1 – Зміна концентрації субстрату на виході з реактора

Як ми бачимо з рис.4.1, при рівномірній подачі стічних вод на момент часу t = 5 год встановлюється стаціонарний режим та концентрація субстрату на виході з реактора становить у межах 15 мг/л. У випадку сценаріїв № 2 та № 3 ми бачимо «сплеск» концентрації субстрату в реакторі та погіршення ефективності його роботи. Але на момент часу t = 9 год реактор уже повертає

свою ефективність. Тобто протягом 1 години реактор може відновити свою ефективність.

На наступному етапі було виконано параметричні дослідження на базі моделі (2.5), (2.14). Розглядалося очищення води в біореакторі за таких параметрів:

$S_{in} = 140$ мг/л – концентрація субстрату ($БПК_{пов}$), що потрапляє в споруду;

$W = 12388$ м^3 – об'єм аеротенка;

$K_1 = 32$ (1/д) – коефіцієнт швидкості деструкції субстрату в реакторі.

Початкова умова: $S_{in} = 140$ мг/л – концентрація субстрату в реакторі для моменту часу $t = 0$.

У ході досліджень визначалась ефективність очищення води при різних значеннях параметра $A = \frac{Q_{in}}{W}$, де Q_{in} – годинна витрата стічних вод, що надходять у біореактор. Тобто цей параметр відповідає за гідродинамічний режим у споруді. Наголосимо, що це є суттєвий параметр, який входить у чисельну модель (2.14) оцінювання ефективності роботи біореактора.

У табл. 4.1 наведено дані щодо зміни з часом концентрації субстрату в біореакторі. Зауважимо, що збільшення параметра A (водообмін) при постійному значенні об'єму аеротенка W означає зростання кількості стічних вод, що надходять у біореактор з часом.

Як ми бачимо з табл. 4.1, зі зростанням параметра A ефективність роботи реактора знижується. Тобто зі зростанням витрати стічних вод, що надходять у реактор об'ємом W, швидкість процесу біологічної деструкції субстрату починає відставати від швидкості процесу руху субстрату в споруді.

Таким чином, наприклад, при аварійному збільшенні кількості стічних вод, що потрапляють у реактор, ефективність очищення води може дуже суттєво знизитися. Якщо у нас є можливість заздалегідь оцінити кількість

стічних вод та інтенсивність їх забруднення при можливих аварійних ситуаціях, ми можемо за допомогою побудованої моделі прогнозувати ефективність роботи біореакторів та розробляти додаткові захисні заходи.

Таблиця 4.1 – Значення концентрації субстрату, мг/л, на виході з реактора для різних значень параметра *A*

Час, год	*A* =0 (1/год)	*A*=1 (1/год)	*A*=6 (1/год)
0	140,0	140,0	140,0
0,12	117,63	117,63	117,64
0,60	58,55	59,34	63,21
1,20	24,48	26,61	36,44
1,80	10,24	13,32	27,10
2,04	7,22	10,57	25,38

Розглянемо питання ефективності очищення води при зміні водообміну в реакторі з теоретичних позицій. Для аналізу будемо використовувати моделююче рівняння (2.5). Запишемо його у вигляді похідної для швидкості зміни концентрації субстрату в реакторі з часом

$$W \cdot \frac{dS}{dt} = Q_s(t) \cdot S_{in}(t) - Q_s(t) \cdot S \ - WK_1 \cdot S \, .$$

Для спрощення приймаємо, що витрата стічних вод постійна та не залежить від часу. Поділимо це рівняння на W (об’єм реактора) та отримаємо таке рівняння:

$$\frac{dS}{dt} = A \cdot S_{in} - A \cdot S \ - K_1 \cdot S \, ,$$

де параметр $A = \frac{Q_s}{W}$ відповідає за гідродинаміку в реакторі.

Розкладемо це рівняння на диференціальному рівні так:

$$\frac{dS}{dt} = A \cdot S_{in}, \tag{4.1}$$

$$\frac{dS}{dt} = -A \cdot S, \tag{4.2}$$

$$\frac{dS}{dt} = -K_1 \cdot S. \tag{4.3}$$

Таке розкладання дозволяє здійснити суттєво спрощений порівняльний аналіз впливу двох факторів на швидкість зміни концентрації субстрату в реакторі. Перший фактор – це швидкість водообміну стічних вод у реакторі (рівняння (4.1). Другий фактор – це швидкість біологічного розпаду в реакторі (рівняння (4.3). Приймемо, що на малому часовому кроці $S_{in} = S$.

Згідно з (4.1) швидкість зміни концентрації субстрату $\frac{dS}{dt}$ внаслідок руху стічних вод у реакторі пропорційна величині A (1/год), а швидкість зміни концентрації субстрату внаслідок біологічних процесів у реакторі пропорційна величині K_1 (1/год).

Тоді, якщо $A<K_1$, то швидкість процесу біологічного очищення перевищує швидкість руху субстрату в реакторі, тобто спостерігатиметься ефективне очищення стічних вод.

Якщо $K_1 < A$, то швидкість руху субстрату в реакторі більша ніж швидкість процесу біологічного очищення, а значить процес біологічного очищення може бути малоефективним.

Для практики перший варіант є дуже важливим.

Зауважимо, що такий аналіз є спрощеним та теоретичним. Він не враховує всіх зв’язків між параметрами моделі, але він дозволяє виявити певну тенденцію. Цю тенденцію унаочнено на рис. 4.2.

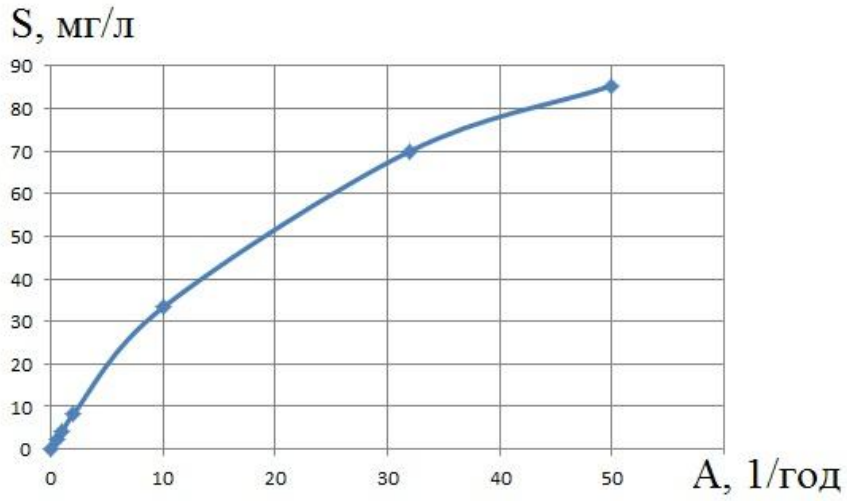


Рисунок 4.2 – Концентрація субстрату на виході з реактора при встановленні стаціонарного режиму

Рис. 4.2 показує значення концентрації субстрату, яка буде виходити з реактора при встановленні в споруді стаціонарного режиму, але за різних значень параметра A. Дані для моделювання такі, як у розглянутій вище задачі. Розрахунок здійснено для параметра $K_1 = 32$ (1/год).

Як ми бачимо з рис. 4.2, зі збільшенням водообміну, тобто зі зростанням параметра A якість очищення води зменшується. Таким чином, для забезпечення ефективного очищення води потрібно організувати водообмін у біореакторі з урахуванням вказаної залежності.

Нижче наведено результати розв'язання задачі з оцінки ефективності роботи біологічного реактора на базі розробленої моделі (2.1), (2.2), (2.12), (2.13), тобто з використанням моделі Monod для опису біологічного очищення стічних вод. Розрахунки виконувалися за таких вхідних даних [113]:

$S_{in} = 160$ мг/л – концентрація субстрату (БПК$_{пов}$), що потрапляє в біореактор;

W =54 м^3 – об'єм реактора;

$Q_s(t)$ = 430 м^3/д – витрата стічних вод;

$X_{in} = 1{,}5$ г/л – концентрація активного мулу, що потрапляє в реактор;

$\mu_{\max} = 1{,}04$ – параметр;

$K_s = 100$ мг/л – параметр;

$K_d = 0.055$ (1/д) – коефіцієнт, що враховує загибель мікрорганізмів;

$Y = 0.55$ - параметр.

Початкова умова: $S_{in} = 160$ мг/л, $X_{in} = 1{,}5$ г/л – концентрація відповідно субстрату та активного мулу в реакторі для моменту часу $t = 0$.

Розглядалося три сценарії:

- сценарій №1: немає подачі стічних вод та активного мулу в реактор, тобто йде процес очищення тільки тих стічних вод, що є в початковий момент у споруді;
- сценарій № 2: спостерігається рівномірна подача стічних вод та активного мулу в реактор;
- сценарій № 3: спостерігається рівномірна подача стічних вод та активного мулу в реактор, але на інтервалі 0,0032 год – 0,016 год збільшується на 70 % концентрація субстрату в стічних водах, що потрапляють на очищення (аварійна ситуація).

На рис. 4.3 показано, як змінюється концентрація субстрату на виході з реактора для першого сценарію.

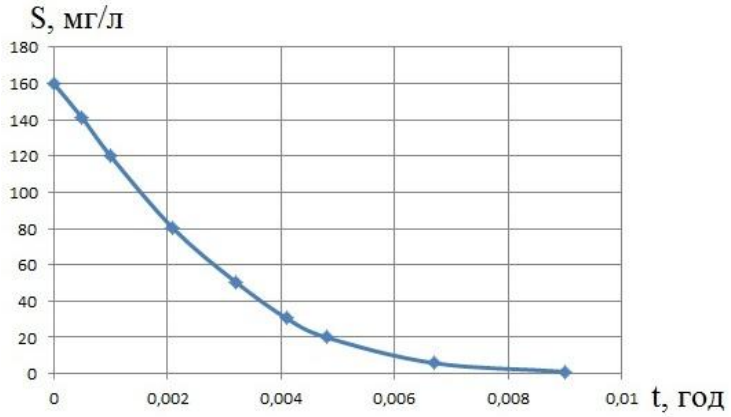


Рисунок 4.3 – Концентрація субстрату на виході з реактора (сценарій №1)

Як ми бачимо з рис. 4.3, у біореакторі з часом спостерігається поступове зниження концентрації субстрату до нуля.

На рис. 4.4, 4.5 показано, як змінюється концентрація субстрату та активного мулу на виході з реактора для другого сценарію. Ці рисунки ілюструють динаміку «виходу» реактора на стаціонарний режим роботи.

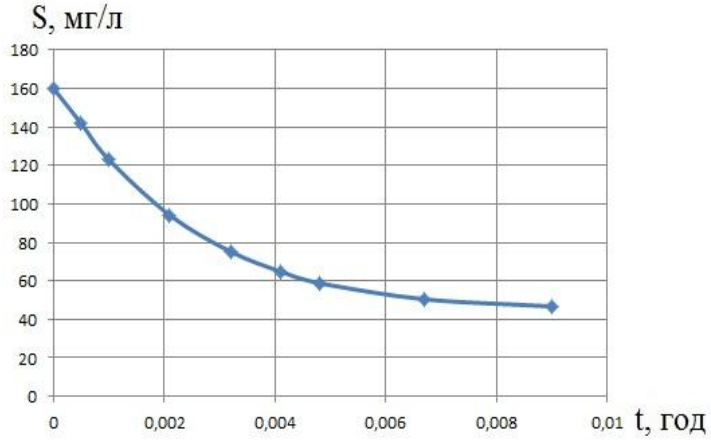


Рисунок 4.4 – Концентрація субстрату на виході з реактора (сценарій № 2)

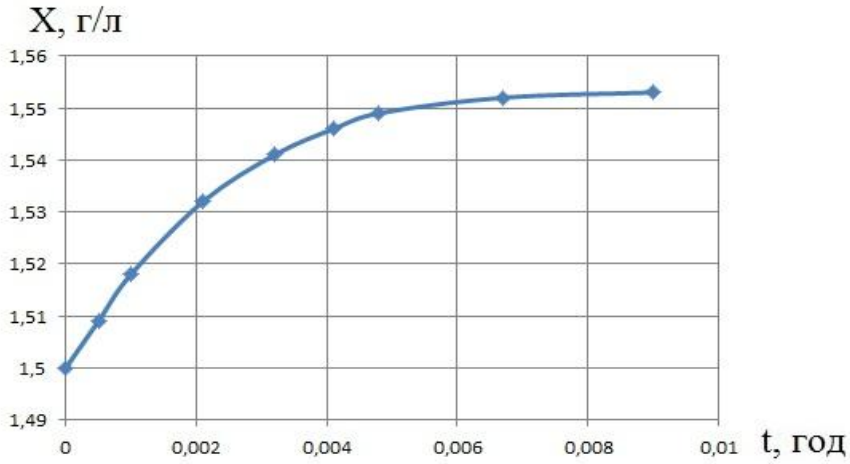


Рисунок 4.5 – Концентрація активного мулу на виході з реактора (сценарій № 2)

На рис. 4.6, 4.7 показано, як змінюється концентрація субстрату та активного мулу на виході з реактора для сценарію № 3, тобто у випадку

раптового збільшення кількості субстрату в стічних водах внаслідок аварії на об’єкті.

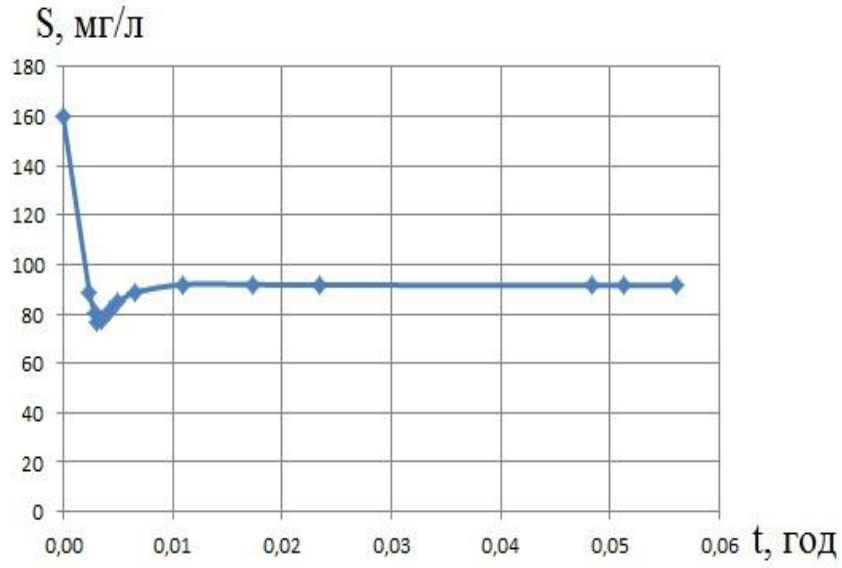


Рисунок 4.6 – Концентрація субстрату на виході з реактора (сценарій № 3)

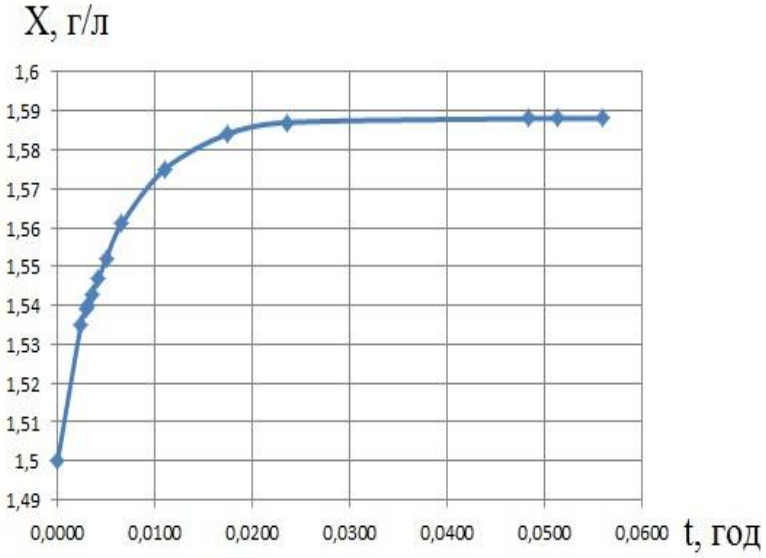


Рисунок 4.7 – Концентрація активного мулу на виході з реактора (сценарій № 3)

Як ми бачимо з рис. 4.6, спочатку спостерігається зменшення концентрації домішки, що виходить з реактора, але з моменту часу приблизно t=0,005 год починається збільшення концентрації субстрату на виході з реактора. Це означає погіршення ефективності біологічного очищення стічних вод. З моменту часу t=0,01 год у реакторі встановлюється усталений режим очищення, але на виході з реактора ми маємо значну концентрацію субстрату, тобто на цьому часовому інтервалі, який розглядається, реактор працює неефективно.

З рис. 4.7 бачимо, що концентрація активного мулу спочатку поступово зростає, а далі виходить на стаціонарний режим.

Зауважимо, що час розрахунку кожної задачі на базі розроблених комп'ютерних моделей та програм становив 0,5 с, тобто розроблені моделі можна використовувати для виконання серійних розрахунків з метою аналізу ефективності роботи реакторів для біологічного очищення стічних вод. Основна вимога до аналізу роботи реакторів на базі побудованих моделей – обґрунтоване визначення вхідних параметрів для моделі.

4.2 Практичне використання двовимірних моделей оцінювання ефективності роботи біореактора

Розглянемо практичне використання побудованої чисельної моделі (2.15), (2.16) для оцінки ефективності роботи біореактора. Ілюструється можливість використання побудованої моделі для розрахунку біореактора, що містить додаткові елементи всередині споруди. Ефективність роботи оцінюється за величиною концентрації субстрату на виході з реактора. Нижче наведено результати розрахунку зміни концентрації субстрату на виході з аеротенка за таких вхідних даних:

$S_{in} = 140$ мг/л – концентрація субстрату ($БПК_{пов}$), що потрапляє в споруду;

розміри біореактора 20 м х 5 м х 5 м;

$Q_s(t)$=4200 м^3/д – витрата стічних вод;

$\mu_x = \mu_y = 2*10^{-4}$ м^2/д;

K_1 = 25 (1/д) – коефіцієнт швидкості деструкції субстрату в реакторі.

Початкова умова: $S_{in} = 140$ мг/л – концентрація субстрату в реакторі для моменту часу t=0.

Розглядалося три сценарії:

- сценарій №1: розглядається реактор без додаткових елементів (це класичний реактор, що має форму басейна, куди потрапляє активний мул та субстрат зі стічними водами);
- сценарій № 2: реактор має один додатковий елемент, що змінює гідродинаміку течії в біореакторі;
- сценарій № 3: реактор має два додаткових елементи, що змінюють гідродинаміку течії в біореакторі.

На рис. 4.8 – 4.10 показано, як змінюється концентрація субстрату на виході з реактора для сценаріїв, що розглядаються. Концентрація є осередненою по ширині реактора. Кожне число на наведених рисунках показує концентрацію субстрату у відсотках від максимальної концентрації. Друк виконано у формате «integer», тому мантиса числа не друкується. Зауважимо, що максимальна концентрація субстрату спостерігається на вході в реактор, вона дорівнює $S_{in} = 140$ мг/л (число 99 на цих рисунках).

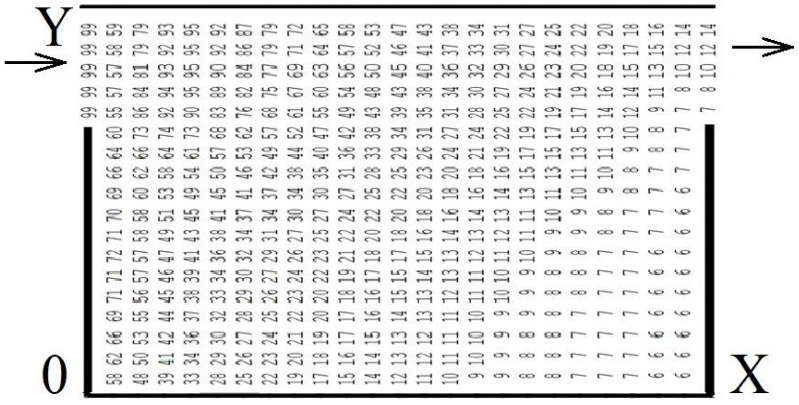


Рисунок 4.8 – Концентрація субстрату в біореакторі без додаткових елементів, t=2,52 год

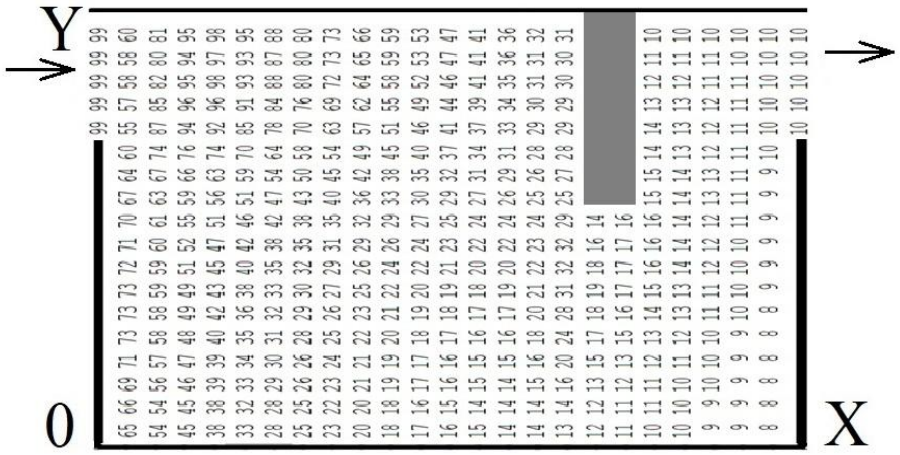


Рисунок 4.9 – Концентрація субстрату в біореакторі, *t*=2,52 год (один додатковий елемент)

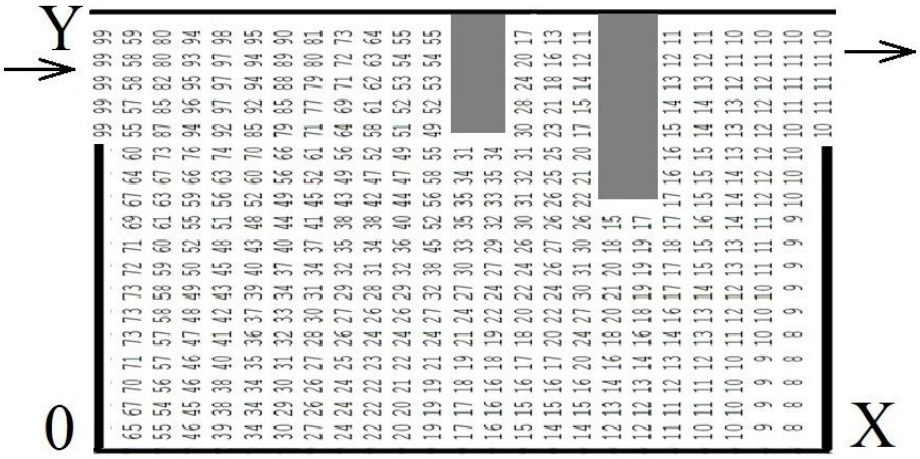


Рисунок 4.10 – Концентрація субстрату в біореакторі, *t*=2,52 год (два додаткових елементи)

Як ми бачимо з наведених рисунків, на розподіл концентрації субстрату значно впливає гідродинаміка течії, що змінюється за допомогою використання додаткових елементів. Так, за відсутності додаткових елементів (сценарій № 1, рис. 4.8), біля правої стінки біореактора формується зона з малою концентрацією субстрату (від 6% до 9% від максимальної

концентрації). Але це – застійна зона, а на вихід з реактора переважно потрапляє стічна вода, що проходить «транзитом» крізь споруду, у верхній частині реактора. У разі використання додаткових елементів має місце зміна напряму руху потоку в споруді – відбувається «розворот» потоку стічних вод в напряму дна реактора. Внаслідок цього поле концентрації субстрату стає більш рівномірним в області біля правої стінки реактора, тому в цю зону потрапляє більша кількість субстрату. Це впливає на значення концентрації субстрату, що виходить з реактора.

Так, у табл.4.2 показано середнє значення концентрації субстрату на виході з реактора для моменту часу t=2,52 год для кожного сценарію. На базі цієї інформації можливо оцінити ефективність роботи біореактора.

Таблиця 4.2 – Середнє значення концентрації, мг/л, субстрату на виході з біореактора для моменту часу t=2,52 год

Показник	Сценарій № 1	Сценарій № 2	Сценарій № 3
Концентрація	22,60	15,21	16,88

Як ми бачим з табл. 4.2, додаткові елементи дозволяють впливати на ефективність очищення води в біореакторі та підвищувати її.

Нижче наведено результати розв'язання задачі з оцінки ефективності роботи біологічного реактора на базі розробленої моделі (2.1), (2.2), (2.12), (2.13), тобто при використанні моделі Monod для опису біологічного очищення стічних вод. Розрахунки виконувалися за таких вхідних даних:

$S_{in} = 360$ мг/л – концентрація субстрату (БПК$_{пов}$), що потрапляє в споруду;

розміри біореактора 15 м х 4 м х 5 м;

$Q_s(t)$=3495 м^3/д – витрата стічних вод;

$\mu_x = \mu_y = 2*10^{-4}$ м^2/д;

$X_{in} = 200$ 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/д – коефіцієнт, що враховує загибель мікроорганізмів.

$Y = 0.55$ – параметр.

Початкова умова: $S_{in} = 360$ мг/л, $X_{in} = 200$ мг/л – концентрація відповідно субстрату та активного мулу в реакторі для моменту часу t=0.

Розглядалися такі сценарії:

- сценарій № 1: реактор працює без додаткових елементів всередині споруди;
- сценарій № 2: реактор має одну пластину всередині споруди (розрахункова область – багатоз'язна);
- сценарій № 3: реактор має дві пластини всередині споруди (розрахункова область – багатоз'язна);
- сценарій № 4: реактор працює як резервуар для деструкції субстрату, але немає руху всередині реактора (субстрат та активний мул не потрапляють в реактор з часом). Резервуар наповнений стічними водами та активним мулом з концентрацією $S_{in} = 360$ мг/л, $X_{in} = 200$ мг/л. Досліджується процес деструкції субстрату в реакторі згідно з моделлю Monod.

Зауважимо, що розрахунок течії в багатоз'язних областях є дуже складною задачею гідродинаміки.

На рис. 4.11 – 4.14 показано, як змінюється концентрація субстрату на виході з реактора для сценаріїв, що розглядаються. Концентрація є осередненою по ширині реактора, t=1,5 год. Кожне число на наведених рисунках показує концентрацію субстрату у відсотках від максимальної концентрації (це концентрація на вході в реактор $S_{in} = 360$ мг/л).

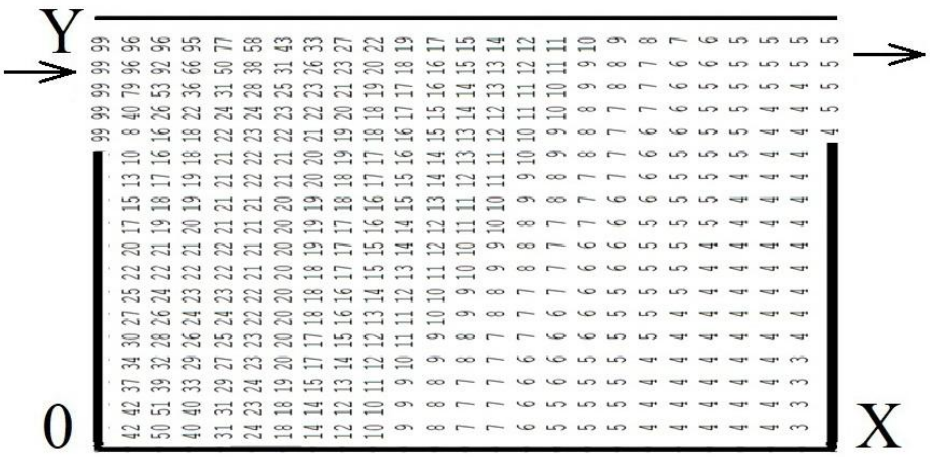


Рисунок 4.11 – Концентрація субстрату в біореакторі (немає пластин, сценарій № 1)

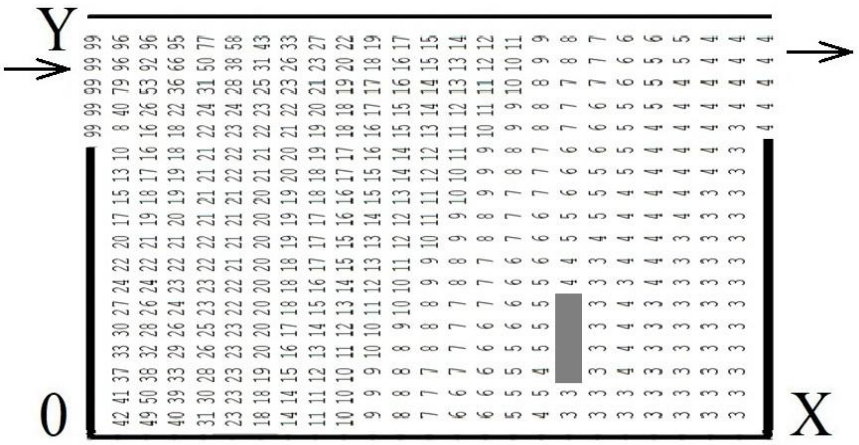


Рисунок 4.12 – Концентрація субстрату в біореакторі (одна пластина, сценарій № 2)

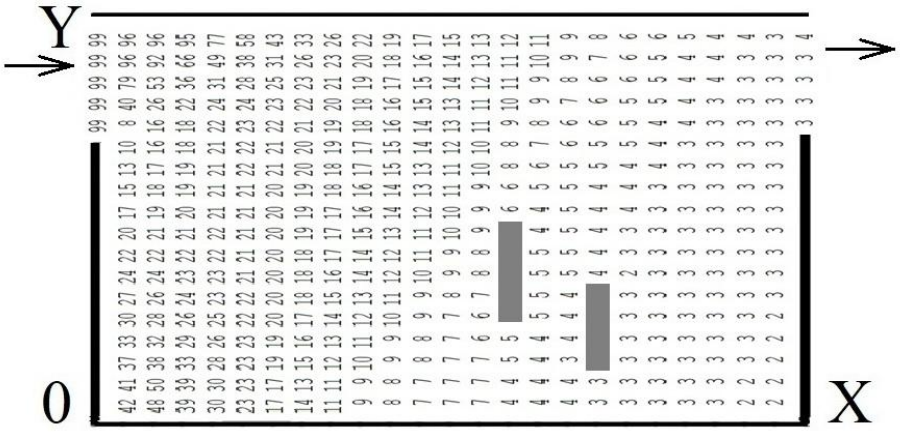


Рисунок 4.13 – Концентрація субстрату в біореакторі (дві пластини, сценарій № 3)

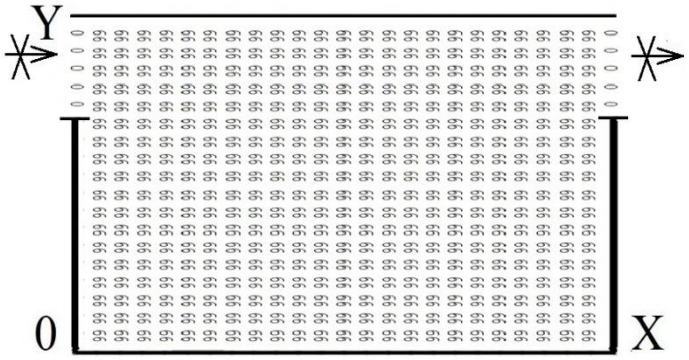


Рисунок 4.14 – Концентрація субстрату в біореакторі *t*=1,5 год (немає течії в реакторі, сценарій № 4)

Як ми бачимо з наведених рисунків, поле концентрації субстрату всередині реактора можна поділити на дві зони. Перша зона відповідає діапазону концентрації від 99% до 10 % та займає приблизно першу половину реактора. Друга зона відповідає концентрації субстрату в діапазоні 10% – 3% (вихід з реактора). Границя між зонами має вигляд «похилої» лінії. Друга зона має навіть «розріджений» вигляд. Значна концентрація субстрату в першій зоні зумовлена постійним потраплянням його в споруду крізь вхідний отвір.

На рис.4.15 показано поле концентрації активного мулу в споруді (кожне число – концентрація активного мулу у відсотках від максимального значення концентрації на цей момент часу, для цього моменту часу $X_{\max} = 620.76$ мг/л). Ця концентрація поступово зменшується від вхідного отвору (тут має місце вхід активного мулу в реактор) до вихідного отвору.

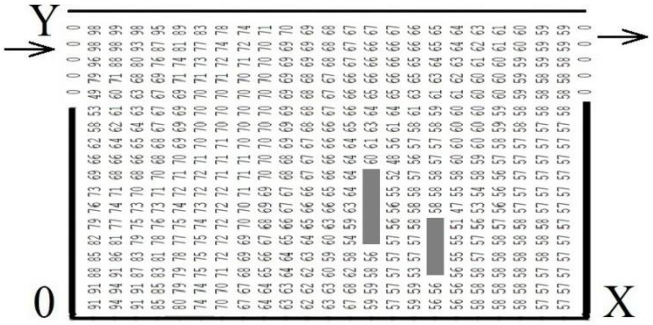


Рисунок 4.15 – Концентрація активного мулу в біореакторі, *t*=1,5 год(дві пластини, сценарій № 3)

Так, у табл. 4.3 показано середнє значення концентрації субстрату на виходи з реактора для моменту часу t=1,5 год, для кожного сценарію.

Таблиця 4.3 – Середнє значення концентрації, мг/л, субстрату на виході з біореактора

Показник	Сценарій №1	Сценарій № 2	Сценарій № 3	Сценарій № 4
Концентрація	19,95	17,37	14,71	1,63

Як ми бачим з табл. 4.3, пластини в споруді дозволяють впливати на ефективність очищення води в біореакторі. Найбільш активно процес очищення води відбувається, коли нема руху в реакторі (сценарій № 4), тобто коли нема потрапляння в реактор нових порцій субстрату. Таким чином, можна зробити висновок: керування якістю очищення стічних вод у біологічних реакторах можливе за рахунок використання додаткових елементів у споруді – пластин.

Також важливо порівняти динаміку швидкості очищення води в реакторі, коли немає руху (сценарій № 4) та коли є рух (сценарій № 1). Біологічні реактори в сценарії № 1 та № 4 мають однакову геометрію реактора, тому таке порівняння є логічним. У табл.4.4 показано результати розрахунків для цих реакторів.

Таблиця 4.4 – Середнє значення концентрації, мг/л, субстрату на виходи з біореактора

Час, год	Сценарій № 4	Сценарій № 1
0,6	148,32	133,81
0,96	44,71	55,38
1,2	12,25	32,76
1,4	2,89	22,66
1,5	1,63	19,95

Аналіз даних з табл. 4.4 показує, що приблизно з моменту часу t=0,96 год, починається уповільнення процесу очищення води в реакторі, де наявний рух (сценарій № 1). До моменту часу 1,5 год концентрація субстрату на виході з реактора, де є рух, уже дуже суттєво відрізняється від концентрації для реактора, де руху немає.

4.3 Керування ефективністю очищення стічних вод у біологічних реакторах шляхом точкового впорскування активного мулу та використання пластин

Результати виконаних чисельних експериментів на базі розроблених моделей дають можливість «побачити» всередині реактора зони, де процес деструкції субстрату відбувається ефективно, а де – ні. Як було показано в п. 4.2, на цей процес можна впливати за рахунок встановлення в реактор додаткових елементів, що змінюють гідродинаміку течії в реакторі й тим самим концентрацію субстрату та активного мулу в споруді. Але також зрозуміло, що на процес біологічного очищення можливо вплинути, якщо, точково здійснити впорскування активного мулу в ці чи інші зони в споруді. Нижче наведено результати розв'язання задачі з оцінки ефективності роботи біологічного реактора саме при точковому впорскування активного мулу в реактор. Дослідження виконані на базі розробленої моделі (2.1), (2.2), (2.12), (2.13), тобто при використанні моделі Monod для опису біологічного очищення стічних вод. Розрахунки виконувалися при таких вхідних даних:

$S_{in} = 360$ мг/л – концентрація субстрату (БПК$_{пов}$), що потрапляє в споруду;

розміри біореактора 15 м х 4 м х 5 м;

$Q_s(t)$=3490 м^3/д – витрата стічних вод;

$\mu_x = \mu_y = 2*10^{-4}$ м^2/д;

$X_{in} = 200$ 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/д – коефіцієнт, що враховує загибель мікроорганізмів;

$Y = 0.55$ – параметр.

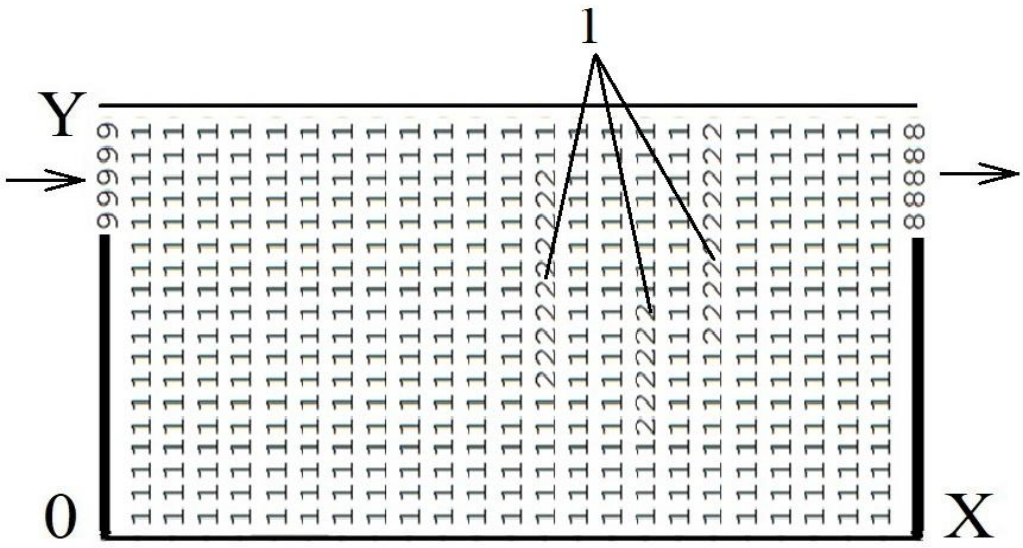
Початкова умова : $S_{in} = 360$ мг/л, $X_{in} = 200$ мг/л. Досліджується процес деструкції субстрату в реакторі згідно з моделлю Monod.

Розглядалися такі сценарії:

- сценарій № 1: реактор працює без додаткових елементів всередині споруди та наявне впорскування активного мулу в трьох зонах (рис. 4.16, точки впорскування активного мулу умовно показані цифрою 2);

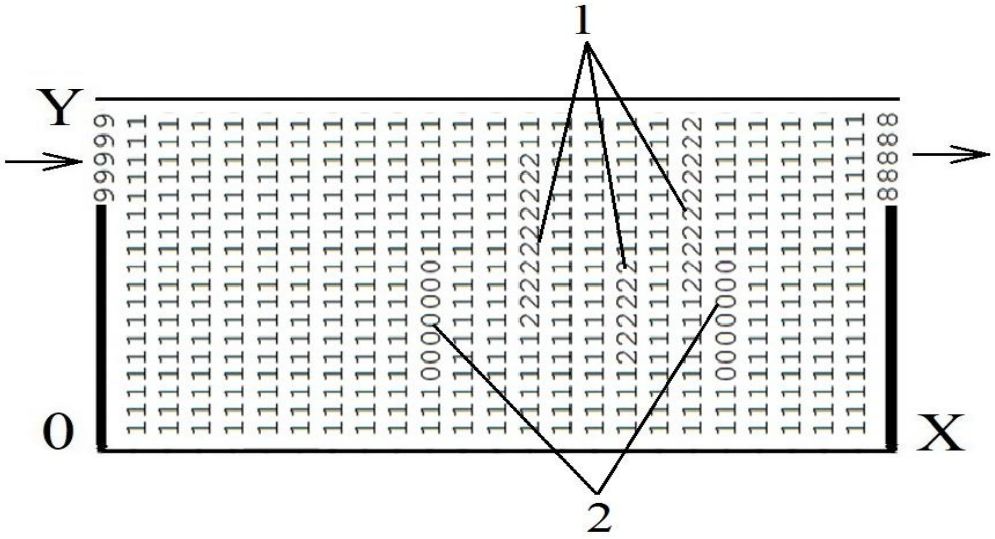
- сценарій № 2: у реакторі є одна пластина та наявне впорскування активного мулу в трьох зонах (рис. 4.17) (розрахункова область – багатоз'язна);

- сценарій № 3: у реакторі є дві пластини та наявне впорскування активного мулу в трьох зонах (рис. 4.18) (розрахункова область – багатоз'язна).



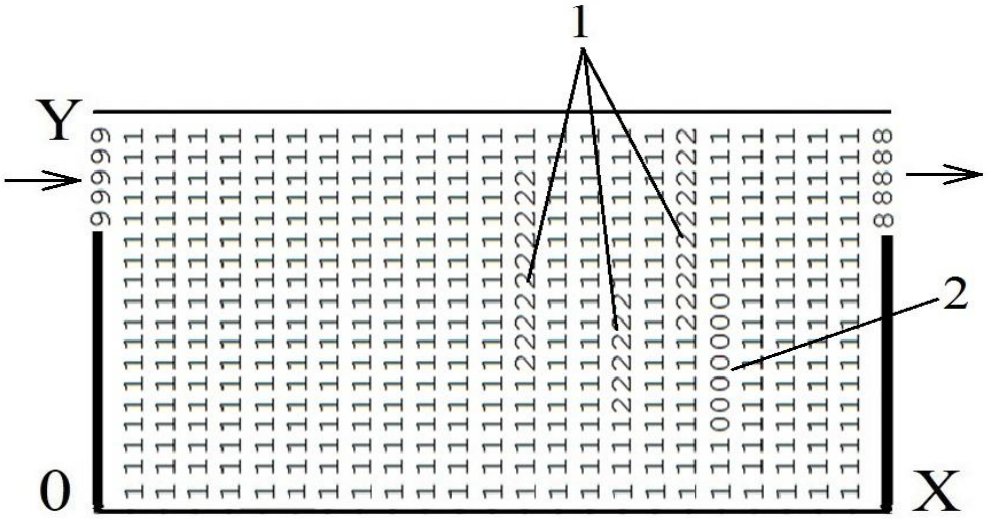
1 – точки впорскування активного мулу

Рисунок 4.16 – Схема розрахункової області (сценарій № 1)



1 – точки впорскування активного мулу; 2 – пластина

Рисунок 4.17 – Схема розрахункової області (сценарій № 2)



1 – точки впорскування активного мулу; 2 - пластина

Рисунок 4.18 – Схема розрахункової області (сценарій № 3)

На рис. 4.19–4.21 показано розподіл концентрації субстрату в реакторі для сценаріїв, що розглядаються (t=1,5 год).

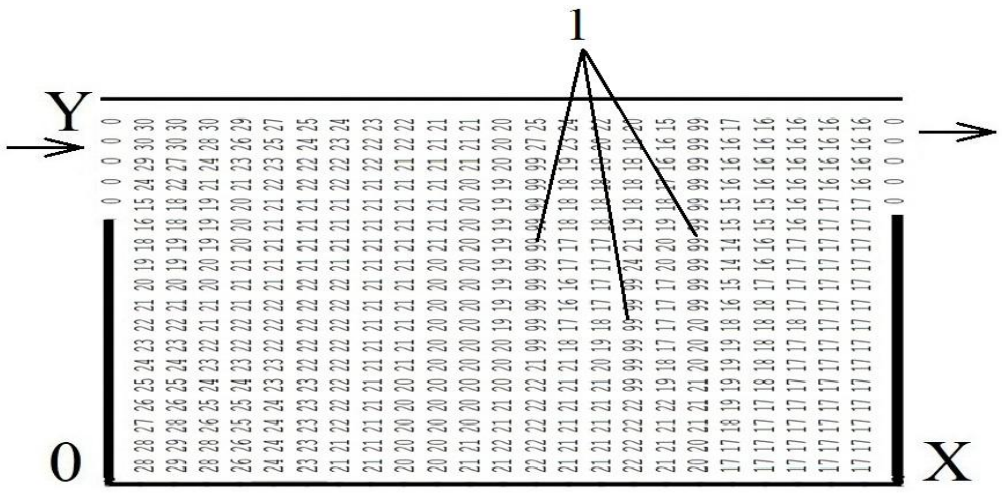
Концентрація є осередненою по ширині реактора. Кожне число на наведених рисунках показує концентрацію субстрату у відсотках від максимальної концентрації (це концентрація на вході в реактор $S_{in} = 360$ мг/л).

Рисунок 4.19 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі (сценарій № 1)

Рисунок 4.20 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі (сценарій № 2)

Рисунок 4.21 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі (сценарій № 3)

Як ми бачимо з наведених рисунків, всередині реактора наявний суттєво нерівномірний розподіл концентрації субстрату. На рис. 4.22 показано розподіл концентрації активного мулу всередині реактора (t=0,96 год). Число «99» показує місце впорскування активного мулу.



1 - місце впорскування активного мулу

Рисунок 4.22 – Розподіл концентрації активного мулу в біореакторі (сценарій № 1)

У табл.4.5 показані дані щодо середньої концентрації субстрату на виході з реактора для кожного сценарію

Таблиця 4.5 – Середня концентрація, мг/л, субстрату на виході з реактора

Показник	Сценарій № 1	Сценарій № 2	Сценарій № 3
Концентрація	13,83	12,12	9,17

Аналіз даних з табл. 4.5 засвідчує, що використання локального впорскування активного мулу дає можливість збільшити ефективність роботи біологічного реактора.

Наприкінці цього параграфа наведемо результати розв'язання модельної задачі на базі цієї моделі. Це моделювання очищення стічних вод в аеротенку коридорного типу. Мета розв'язання цієї модельної задачі – показати здатність розробленої моделі для розрахунку очисних споруд з такою геометрією, а також при використанні «нереальних» даних. Тут під терміном «нереальні» маються на увазі дані, що суттєво відрізняються від типових. Вибір такого підходу зумовлено необхідністю показати стійкість розроблених чисельних моделей. Це пов'язано з тим, що деякі чисельні моделі втрачають стійкість, наприклад, при невідповідності габаритів споруди та швидкості течії коефіцієнтам дифузії. На практиці така ситуація може виникнути, коли, наприклад, користувач помилково увів неправильні початкові дані.

Розрахунки виконано при вхідних даних: розміри біореактора 10 м х 5 м х 5 м; 0,005 м/д – швидкість потоку на вході в аеротенк; $S_{in} = 100$ мг/л – концентрація субстрату, що потрапляє в аеротенк; $X_{in} = 2$ мг/л – концентрація активного мулу, що потрапляє в аеротенк ; $\mu_x = \mu_y = 0{,}007$ м^2/д. Впорскування активного мулу здійснюється біля виходу з реактора.

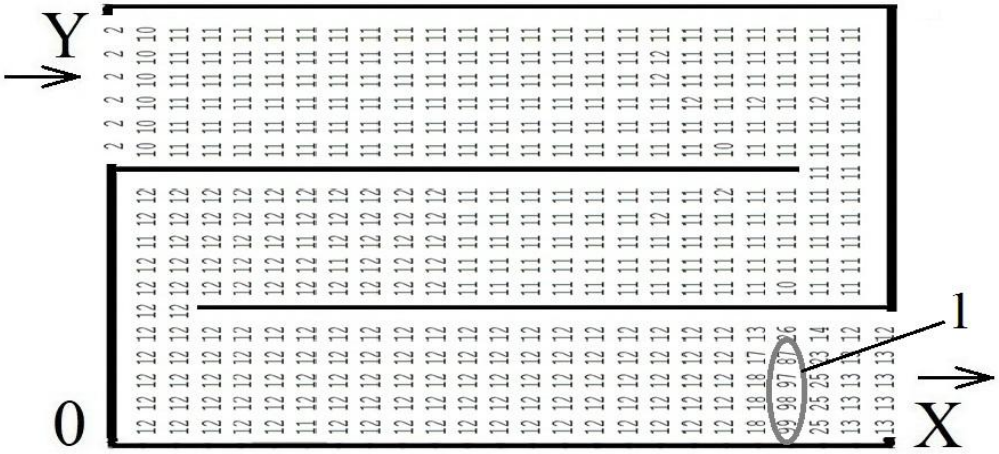
Параметри для розрахунку процесу окиснення субстрату, згідно з моделлю Monod, такі, як у попередній задачі.

Результати розподілу концентрації субстрату та активного мулу всередині реактора наведені для часу t=1,25 год.

З рис. 4.23 ми бачимо, що концентрація субстрату на виході з аеротенка становить 79 % від концентрації на вході в реактор. Також у перерізі, що розташований біля виходу з реактора, концентрація субстрату значно менша та дорівнює від 46 % до 72 %. Це переріз, де має місце додаткове впорскування активного мулу. Цей переріз додаткового впорскування активного мулу чітко показаний на рис. 4.24. Підкреслимо, що впорскування

активного мулу здійснюється тільки в 4 точках. У цих точках перерізу концентрація активного мулу дорівнює 87 % – 99 %.

Рисунок 4.23 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі



1– місце точкового впорскування активного мулу

Рисунок 4.24 – Розподіл концентрації активного мулу в біореакторі

4.4 Дослідження роботи біологічного реактора на базі 3D-моделі

Нижче наведено результати розв’язання задачі з оцінки ефективності роботи біологічного реактора з очищення стічних вод на базі розробленої 3D CFD-моделі (розділ 2). Для опису процесу біологічної деструкції субстрату

використовується модель Monod. Розрахунки виконувалися за таких вихідних даних:

$S_{in} = 140$ мг/л – концентрація субстрату (БПК$_{пов}$), що потрапляє в споруду;

розміри біореактора 15 м х 4 м х 4 м;

$Q_s(t)$=1353 м^3/д – витрата стічних вод;

$\mu_x = \mu_y = 2*10^{-4}$ м^2/д;

$X_{in} = 200$ 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/д – коефіцієнт, що враховує загибель мікроорганізмів;

$Y = 0.55$ – параметр.

Початкова умова: $S_{in} = 140$ мг/л, $X_{in} = 200$ мг/л – концентрація відповідно субстрату та активного мулу в реакторі для моменту часу t=0.

Розглядалися такі сценарії:

- Сценарій № 1: реактор працює без додаткових елементів всередині споруди;
- Сценарій № 2: у реакторі є дві суцільні пластини всередині споруди (розрахункова область – багатоз'язна).
- Сценарій № 3: у реакторі є три пластини, але вони мають «розрив», тобто у розрахунковій області наявне впорскування активного мулу в трьох зонах (рис. 4.18).

Досліджується процес деструкції субстрату в реакторі з часом згідно з моделлю Monod та з урахуванням масопереносу.

Слід підкреслити, що розрахунок просторової течії в багатоз'язних областях є дуже складною задачею гідродинаміки.

Оцінка ефективності роботи біореактора визначається за величиною концентрації субстрату на виході з реактора. Нижче на рисунках показано розподіл концентрації субстрату в біореакторі для усіх сценаріїв. Оскільки вирішується тривимірна задача, то концентрація показана в різних перерізах біореактора.

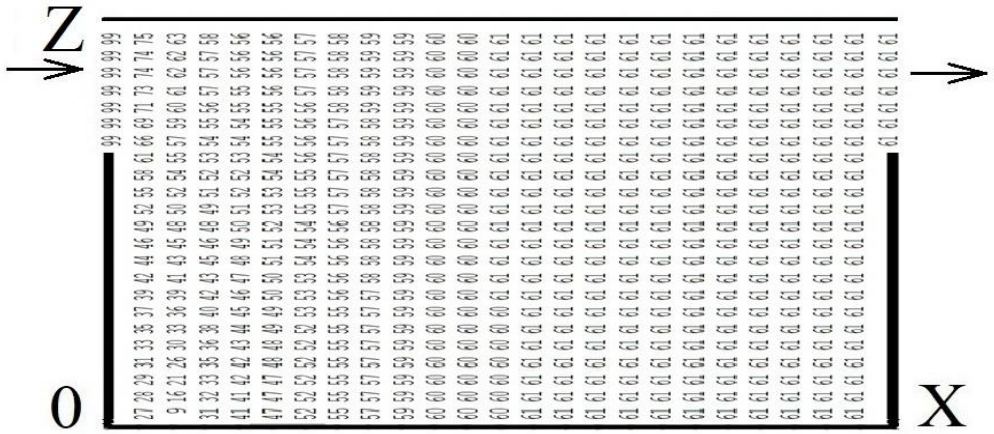


Рисунок 4.25 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі, переріз y=2 м, t=0,24 год (сценарій № 1)

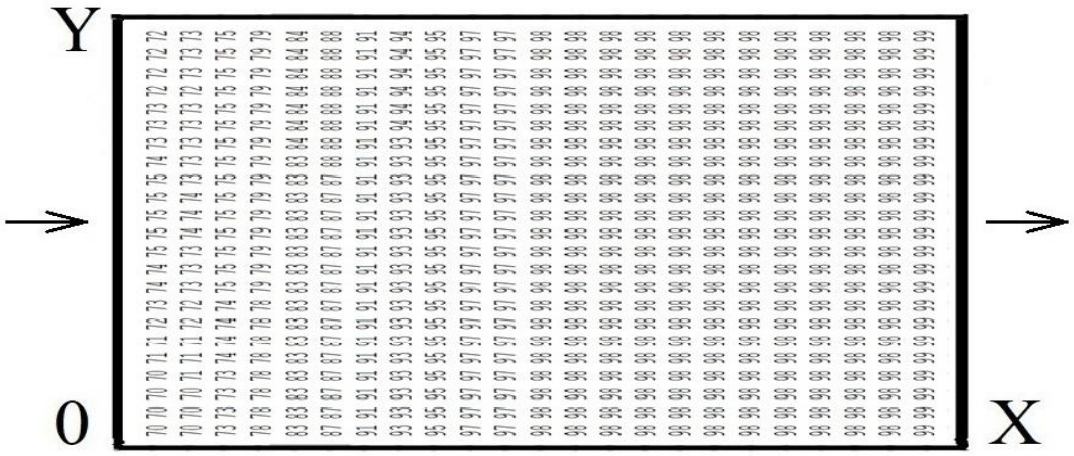


Рисунок 4.26 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі, переріз z = 2м, t = 0,24 год (сценарій № 1)

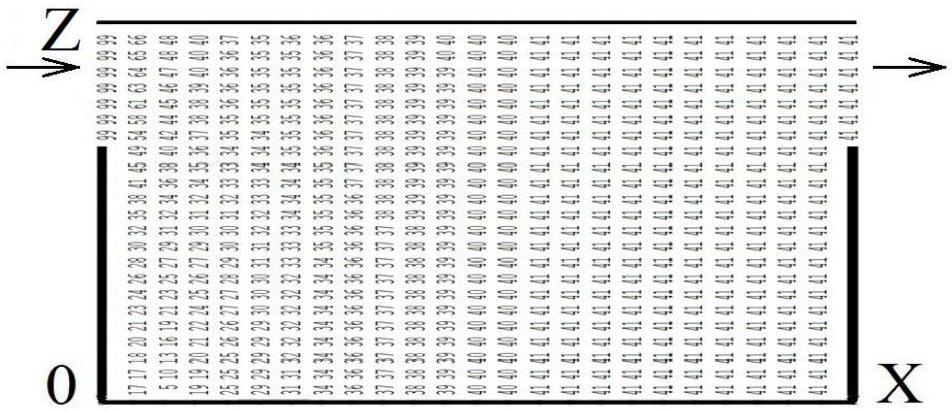


Рисунок 4.27 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі, переріз *y*=2 м, *t*=0,40 год (сценарій № 1)

Рисунок 4.28 Розподіл концентрації субстрату в біореакторі, переріз *y*=2 м, *t*=0,40 год (сценарій № 2)

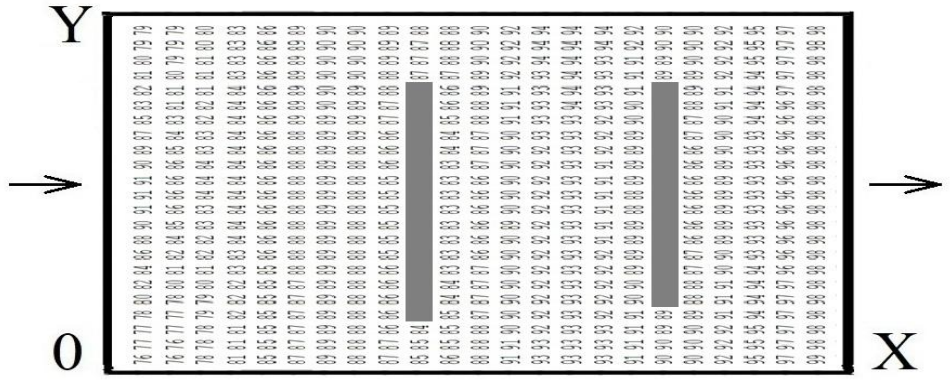


Рисунок 4.29 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі, переріз *z*=2 м, *t*=0,40 год (сценарій № 2)

Рисунок 4.30 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі, переріз y=2 м, t=0,40 год (сценарій № 3)

Як ми бачимо з наведених рисунків, розроблені чисельні моделі дають уявлення про розподіл концентрації субстрату в різних частинах біореактора. Видно, що всередині реактора наявний суттєво нерівномірний розподіл концентрації субстрату, тобто процес біологічного очищення йде нерівномірно. Використання пластин у реакторі змінює розподіл концентрації в споруді, що впливає на ефективність роботи реактора.

Для аналізу ефективності роботи реактора в табл. 4.6 наведено концентрацію субстрату на виході з реактора для моменту часу t=0,40 год.

Таблиця 4.6 – Середня концентрація, мг/л, субстрату на виході з реактора

Показник	Сценарій № 1	Сценарій № 2	Сценарій № 3
Концентрація	147	128	118

Аналіз даних з табл. 4.6 показує, що використання пластин дає можливість збільшити ефективність роботи біологічного реактора. Тобто таким чином ми маємо можливість керувати процесом очищення стічних вод в біореакторі.

4.5 Моделювання роботи реактора з рухомим біоценозом

Нижче наведено результати розв'язання задачі з оцінки ефективності роботи біологічного реактора з рухомими носіями біоценозу на базі побудованої квазідинамічної моделі. Розрахунки виконувалися за таких вихідних даних:

$S_{in} = 150$ мг/л – концентрація субстрату (БПК$_{пов}$), що потрапляє в споруду;

$X_{in} = 1200$ мг/л – концентрація активного мулу, що потрапляє в споруду;

розміри біореактора 18 м х 5 м х 5 м;

$Q_s(t)$=4726 м^3/д – витрата стічних вод;

$\mu_x = \mu_y = 3*10^{-4}$ м^2/д;

$X_{in} = 1200$ 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/д – коефіцієнт, що враховує загибель мікроорганізмів.

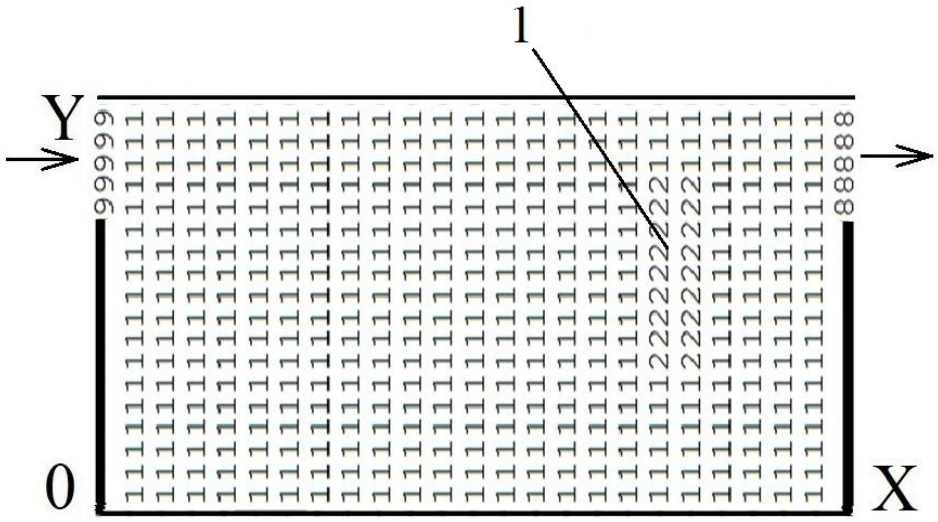
$Y = 0.55$ – параметр.

активна площа поверхні носіїв 400 м^2/м^3.

Початкова умова: $S_{in} = 150$ мг/л, $X_{in} = 1200$ мг/л – концентрація відповідно субстрату та активного мулу в реакторі для моменту часу t=0.

Розглядалися такі сценарії:

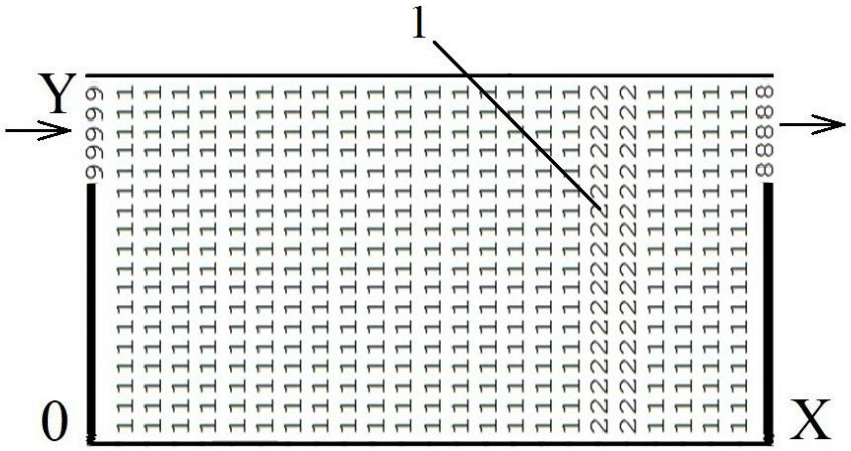
- Сценарій №1: реактор працює без рухомих носіїв біоценозу, тобто це класичний аеротенк, куди потрапляє активний мул та субстрат.
- Сценарій № 2: у реакторі є невелика зона, де є рухомі носії біоценозу; ця зона не покриває весь реактор по ширині (рис. 4.28, зона, де є носії біоценозу, показана цифрою 2). Цей сценарій моделює використання в частині реактора блоків з рухомими носіями, які показано на рис. 4.31.



1 – зона, де розташовані рухомі носії біоценозу (сценарій №2)

Рисунок 4.31 – Схема розрахункової області

- Сценарій № 3: у реакторі є вузька зона, де є рухомі носії біоценозу; ця зона покриває весь реактор по ширині, площа зони 8 % від площі реактора (рис. 4.29, зона, де є носії біоценозу, показана цифрою 2).

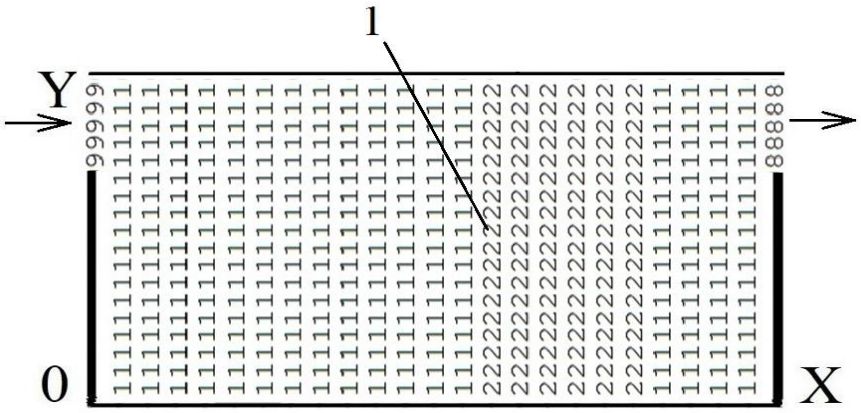


1 – зона, де розташовані блоки з рухомими носіями біоценозу

(сценарій № 3)

Рисунок 4.32 – Схема розрахункової області

- Сценарій № 4: у реакторі є вузька зона, де є рухомі носії біоценозу; ця зона покриває весь реактор по ширині, площа зони 25 % від площі реактора (рис. 4.30, зона, де є носії біоценозу, показана цифрою 2).



1 – зона, де розташовані блоки з рухомими носіями біоценозу (сценарій № 4)

Рисунок 4.33 – Схема розрахункової області

Нижче на рисунках показано розподіл концентрації субстрату в реакторі (t=0,34 год) для усіх сценаріїв. Концентрація є осередненою по ширині реактора. Кожне число на цих рисунках показує концентрацію субстрату у відсотках від максимальної концентрації (це концентрація на вході в реактор $S_{in} = 150$ мг/л).

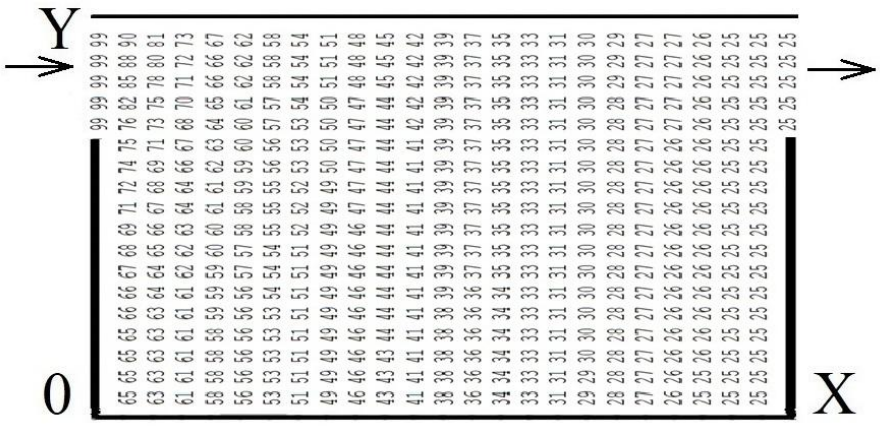


Рисунок 4.34 - Розподіл концентрації субстрату в біореакторі (сценарій № 1, немає рухомих носії біоценозу)

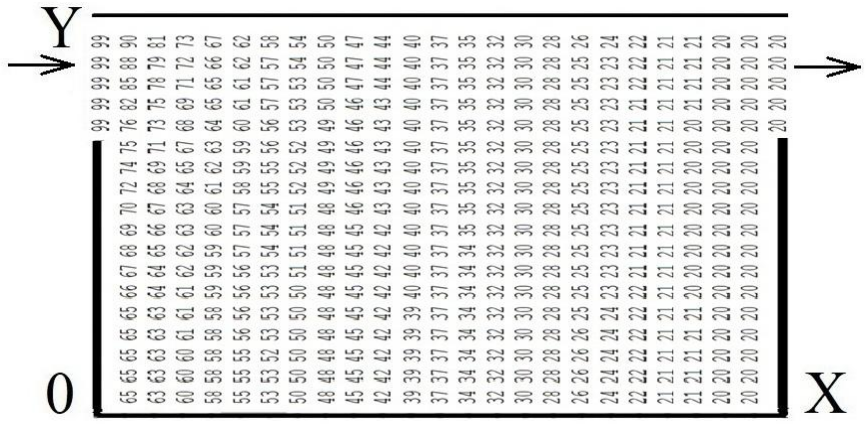


Рисунок 4.35 - Розподіл концентрації субстрату в біореакторі (сценарій № 2, є рухомі носії біоценозу)

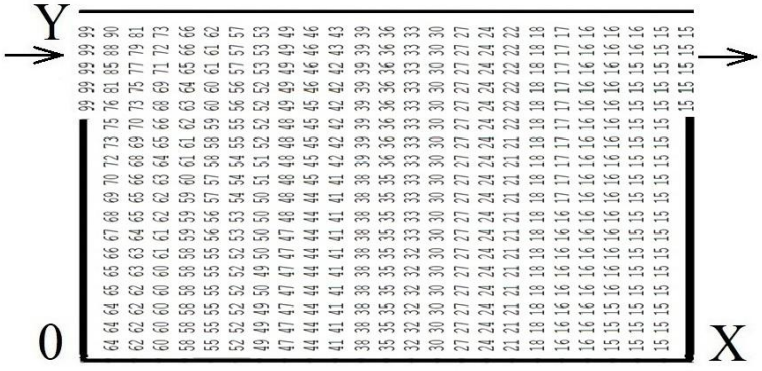


Рисунок 4.36 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі (сценарій № 3, є рухомі носії біоценозу)

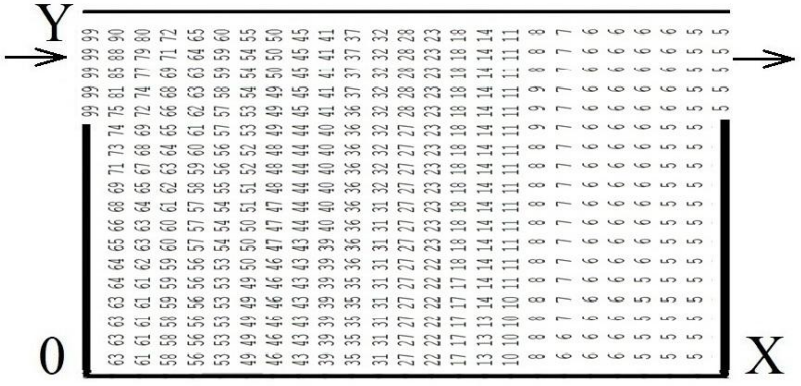


Рисунок 4.37 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі (сценарій № 4, є рухомі носії біоценозу)

Як ми бачимо з наведених рисунків, там де є блоки з рухомими носіями біоценозу, значно швидше відбувається процес окиснення субстрату. Наприклад, якщо розглядати перший сценарій (немає рухомих носіїв біоценозу) та сценарій № 4, у зоні приблизно на 1/3 від правої стінки споруди концентрація субстрату дорівнює 34 % від концентрації на вході в біореактор, а для сценарію № 4 – концентрація субстрату тут дорівнює приблизно 17 % від концентрації на вході в біореактор. Вплив блоків з рухомими носіями біоценозу на ефективність очищення стічних вод можна оцінити за концентрацією на виході з реактора (табл. 4.7, *t*=0,34 год)

Таблиця 4.7 – Середня концентрація, мг/л, субстрату на виході з реактора з рухомим біоценозом

Показник	Сценарій № 1 (нема носіїв)	Сценарій № 2	Сценарій № 3	Сценарій № 4
Концентрація	39,07	31,23	24,12	9,07

Як ми бачимо з табл. 4.7, для сценарію № 4 концентрація субстрату на виході з реактора практично в 4 рази менша ніж для сценарію № 1, коли в реакторі відсутні рухомі носії біоценозу.

Зауважимо, що час розрахунку для кожного сценарію становив 4 с. Таким чином, за допомогою побудованих моделей можливо оперативно визначати ефективність роботи реакторів з рухомими носіями біоценозу.

На другому етапі було виконано обчислювальний експеримент на базі побудованої моделі, що враховує рух самих носіїв біоценозу (розділ 3).

Розрахунки виконувалися за таких вихідних даних [113]:

$S_{in} = 150$ мг/л – концентрація субстрату ($БПК_{пов}$), що потрапляє в споруду;

$X_{in} = 1200$ мг/л – концентрація активного мулу, що потрапляє в споруду;

розміри біореактора 20 м х 5 м х 5 м;

$Q_s(t)$=4704 м^3/д – витрата стічних вод;

$\mu_x = \mu_y = 3*10^{-4}$ м^2/д;

$\mu_{\max} = 1.04$ – параметр;

$K_s = 100$ мг/л – параметр;

$K_d = 0.055$ 1/д – коефіцієнт, що враховує загибель мікроорганізмів;

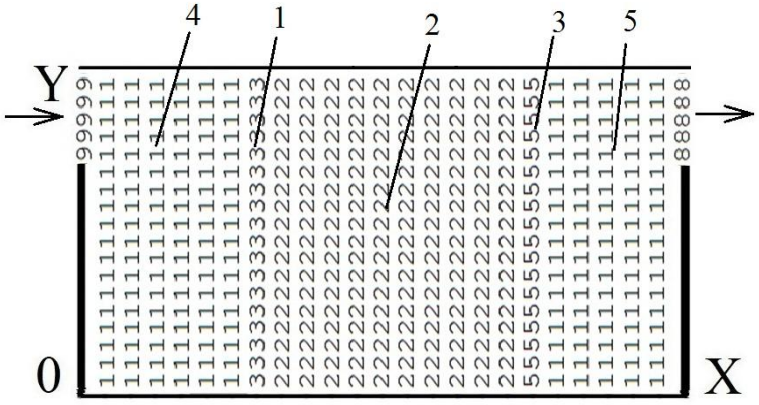
$Y = 0.55$ – параметр;

активна площа поверхні носія 0,001 м^2.

максимальна кількість носіїв у реакторі: C_m=120*10^3 штук/м^3.

Початкова умова (для моменту часу t=0): $S_{in} = 150$ мг/л – концентрація субстрату в реакторі; C_m=90*10^{3}штук/м^3 – кількість носіїв у реакторі; $X_{in} = 1200$ мг/л – концентрація активного мулу.

На рис.4.33 показано схему розрахункової області. Для зручності, у розрахунковій області виділено декілька зон. Перша зона – це зона №1, що розташована в тій частині реактора, де спостерігається потрапляння субстрату в реактор. Друга зона – зона № 2, де є рухомі носії біоценозу. Третя зона – зона № 3, що прилягає до вихідного отвору з реактора (тут, як у першій зоні, немає рухомих носіїв біоценозу).



1 – ліва межа зони, де є рухомі носії біоценозу ; 2 – зона, де є рухомі носії біоценозу ; 3 – права межа зони, де є рухомі носії біоценозу ; 4 – перша зона; 5 – третя зона

Рисунок 4.38 – Схема розрахункової області

Нижче на рисунках показано розподіл концентрації субстрату та рухомих носіїв біоценозу в реакторі для різних моментів часу. Концентрація цих величин е осередненою по ширині реактора. Кожне число на наведених рисунках показує концентрацію субстрату та рухомих носіїв у відсотках від максимальної концентрації (для субстрату ця концентрація дорівнює $S_{in} = 150$ мг/л, а максимальна концентрація рухомих носіїв біоценозу дорівнює C_m=120*10^{3}штук/м^3).

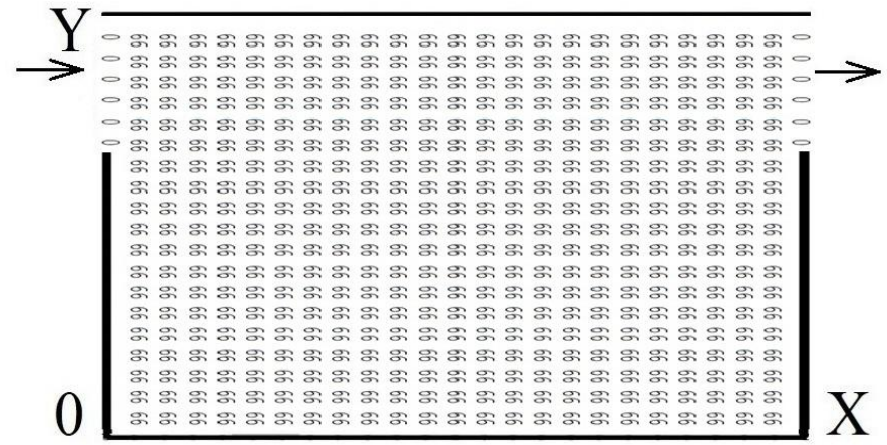


Рисунок 4.39 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі на початку розрахунку (t=0)

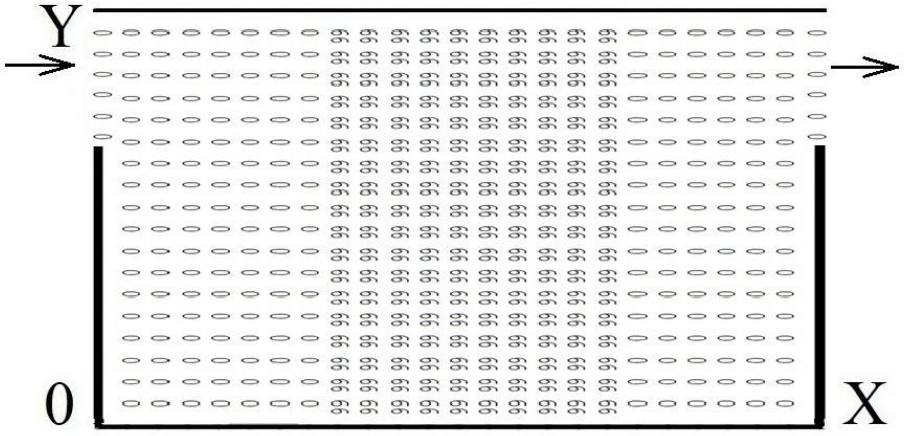


Рисунок 4.40 - Розподіл концентрації рухомих носіїв біоценозу в біореакторі на початку розрахунку (t=0, числу 99 відповідає концентрація C_m=90*10^3 штук/м^3)

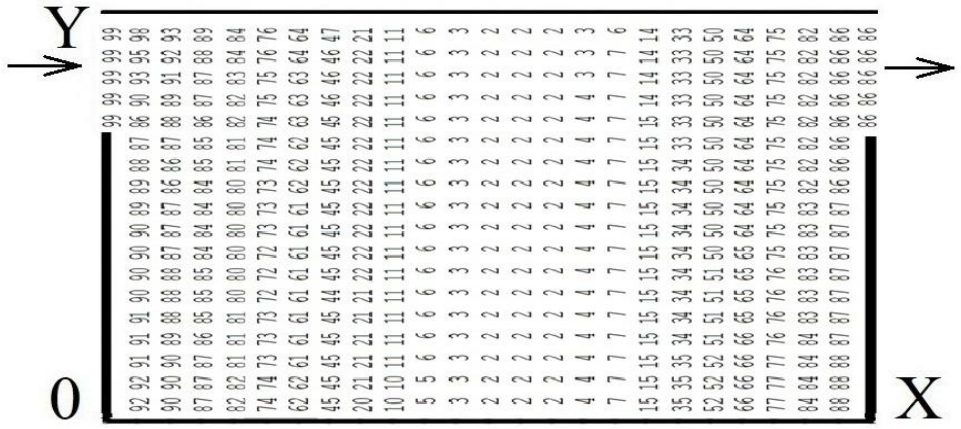


Рисунок 4.41 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі (*t*=2,2 год)

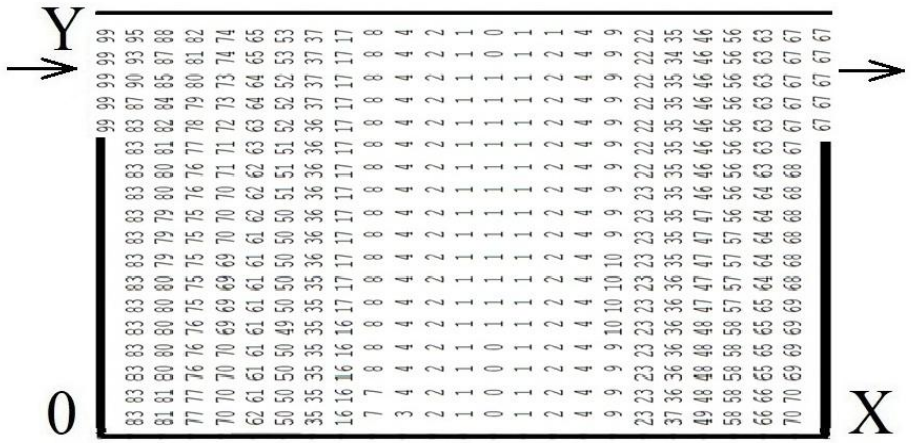


Рисунок 4.42 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі (*t*=3,5 год)

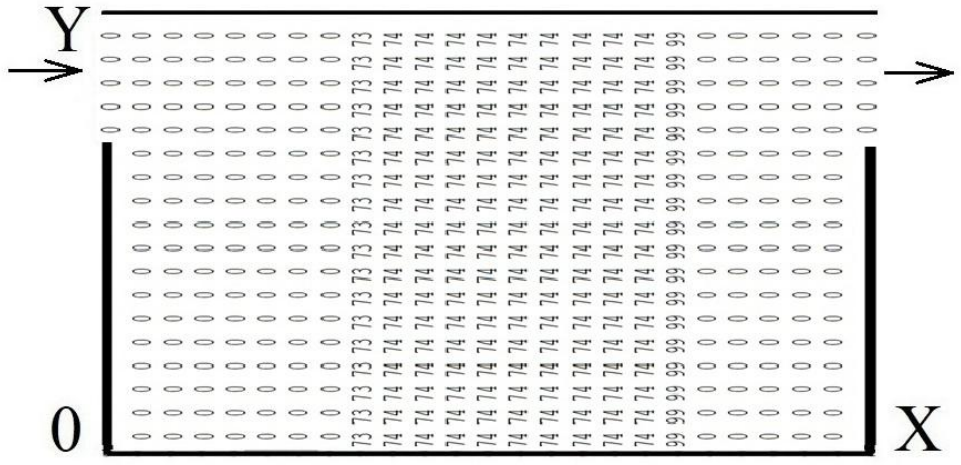


Рисунок 4.43 – Розподіл концентрації рухомих носіїв біоценозу в біореакторі (*t*=4.1, числу 99 відповідає концентрація C_m =120*10^3 шт/м^3)

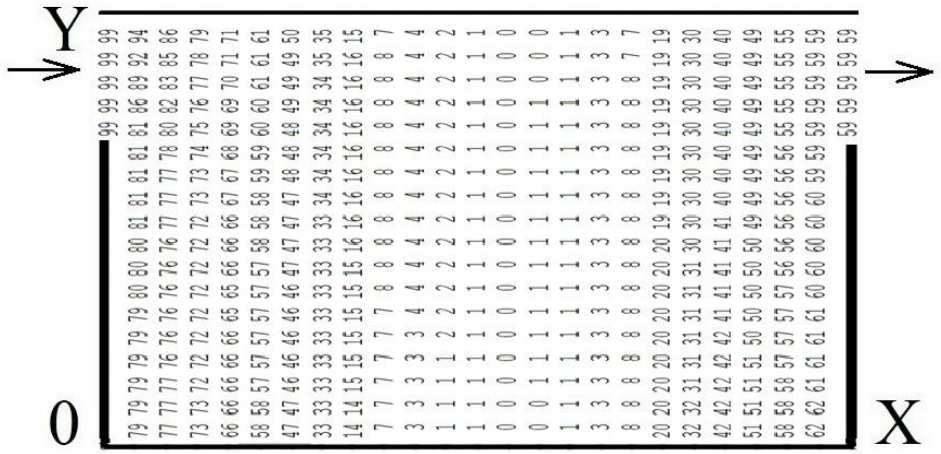
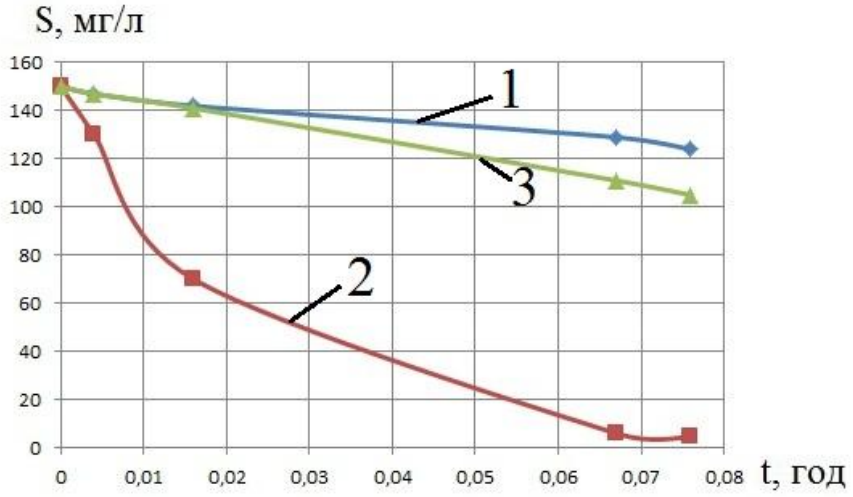


Рисунок 4.44 – Розподіл концентрації субстрату в біореакторі (*t*=4,21 год)

Аналіз наведених рисунків показує, що найбільш активно процес очищення стічних вод відбувається всередині зони № 2, тобто зони розташування рухомих носіїв біоценозу.

На рис. 4.45 показана зміна концентрації субстрату всередині трьох характерних зонах біореактора (рівень *y* = 2 м).



1– перша зона; 2 – зона, де є рухомі носії біоценозу; 3 – третя зона

Рисунок 4.45 - Розподіл концентрації субстрату в біореакторі з часом

У табл. 4.8 показано розподіл концентрації рухомих носіїв біоценозу на початку зони їх розташування в біореакторі (початок зони № 2, рівень y=2 м), а в табл.4.9 наведено розподіл концентрації рухомих носіїв біоценозу в центрі зони № 2 (рівень y=2 м).

Таблиця 4.8 – Розподіл концентрації рухомих носіїв біоценозу на початку зони їх розташування (початок зони № 2)

t , год	C, шт/м^3
0	90 000
0,5	72330
1,1	71700
2,1	70510
2,8	69680
3,4	68950
3,9	68380

Таблиця 4.9 – Розподіл концентрації рухомих носіїв біоценозу в центрі біореактора (зона № 2)

t, год	C, шт/м^3
0	90 000
0,021	74280
0,045	71960
0,088	70980
0,117	70250
0.144	69620
0,165	69100

Як можна персвідчитися з табл. 4.8, 4.9, внаслідок руху носіїв біоценозу наявна зміна їх концентрації в різних точках біореактора. Також можна наголосити, що на початку зони розміщення носіїв швидкість зміни концентрації носіїв більша, ніж у центрі зони №2. Внаслідок такої зміни буде

мати зміна ефективності очищення стічних вод у зоні розташування рухомих носіїв біоценозу.

4.6 Верифікація розроблених методів

Для верифікації розроблених методів використовувалися розв'язки відомих тестових задач та експериментальні дані.

Задача № 1. Верифікація двовимірної гідродинамічної моделі, що базується на рівнянні (2.24), (3.14).

Розглядається розв'язання першої крайової задачі для двовимірного нестаціонарного рівняння теплопровідності: це прямокутна пластина, початкова температура якої дорівнює 1800˚С; розміри пластини 55 м × 55м. Гранична умова: T_0 = 0 ˚С. Процес зміни температури описується рівнянням вигляду (2.24), (3.14) відносно функції *T*.

Аналітичний розв'язок такий [56]:

$$T = T_0 \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{y}{2\sqrt{at}}\right).$$

Будемо розраховувати функцію *T* в точці *x* = 1 м, *y* = 1 м. Приймаємо: *a* = 1. Результати розрахунку наведено в табл. 4.10. У чисельнику подано дані, отримані на сітці 20х20 комірок, у знаменнику – розрахунок на сітці 40х40 комірок.

Таблиця 4.10 –Значення температури для різних способів розв'язку, ^{0}С

Час, с	Аналітичний розв'язок	Розв'язок на базі методу Річардсона	Розв'язок на базі методу умовної апроксимації
3	172,98	172,93 /172,96	173,12 /173,04
5	107,16	107,09 /107,13	107,22 /107,19
7	79,38	79,29/79,27	79,44/79,41

Як ми бачимо з табл. 4.10, ми маємо задовільне узгодження між аналітичними значеннями та результатами чисельного моделювання.

Задача № 2. Верифікація тривимірної гідродинамічної моделі, що базується на рівняннях (2.24), (3.14).

Розглядається розв'язання першої крайової задачі для тривимірного нестаціонарного рівняння теплопровідності: це прямокутна пластина, початкова температура пластини становить 2000 ˚С; розміри пластини 5 **м** × 5 м × 5 м. Гранична умова: T_0 = 0 ˚С. Процес зміни температури описується рівнянням вигляду (2.40) відносно функції *T*.

Аналітичний розв'язок такий [56]:

$$T = T_0 \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{y}{2\sqrt{at}}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{at}}\right)$$

Будемо розраховувати функцію *T* в точці *x* = 1 м, *y* = 1 м, *z*=1 м. Приймаємо: *a* = 1.

Результати розрахунку наведено в табл. 4.11. У чисельнику подано дані, отримані на сітці 20x20x20 комірок, у знаменнику – розрахунок на сітці 40x4

0x40 комірок.

Таблиця 4.11 – Значення температури, ^{0}C

Час, с	Аналітичний розв'язок	Чисельний розв'язок
3	59,58	59,36 /59,54
5	29,05	28,88 /29,00
7	18,52	18,31 /18,48

Як бачимо з табл. 4.11, ми маємо задовільне узгодження між аналітичними значеннями та результатами чисельного моделювання.

Задача № 3. У цій задачі здійснюється порівняння результатів чисельного моделювання (розрахунок течії на базі рівняння (2.40)) з експериментальними даними з роботи [123]. Моделюється рух рідини в

прямокутному резервуарі: 200 см х 50 см х 30 см, витрата: Q=2 л/с (рис. 4.46) [123**].**

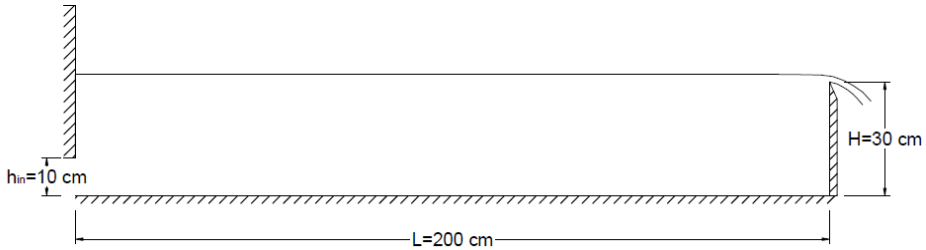


Рисунок 4.46 – Схема резервуара [123]

Результати розрахунку швидкості потоку наведено в табл**.** 4.13**.** Розрахунок здійснювався на сітці 40 х 40 х 30 комірок.

Таблиця 4.12 – Значення швидкості потоку, см/с, в різних точках

Показник	x, см		
	10	46	82
U (розрахунок, метод Річардсона)	3,66	3.62	3,58
U (розрахунок, [123])	4,00	4,00	4,00
U (експеримент, [123])	4,20	4,00	3,80

За даними табл. 4.12 маємо задовільне узгодження між експериментальними значеннями та результатами чисельного моделювання.

Задача № 4. Розглядається відома тестова задача про емісію забруднювача з точкового джерела. Параметри задачі[2]:

- $M = 10^6$ мг/с – інтенсивність викиду з джерела;
- K_z=5 м^2/с – коефіцієнт дифузії;
- W =4 м/с – швидкість руху середовища;
- K_y=500 м^2/с – коефіцієнт дифузії;
- H=120 м – висота викиду;
- Y=0; H=120 м; Z=120 м – розрахунковий рівень.

Аналітичний розв'язок задачі з визначення концентрації домішки має вигляд [5]

$$C = \frac{M}{4\pi x\sqrt{k_y k_z}} \exp\left(-\frac{Wy^2}{4kyx}\right) \times \left\{ \exp\left[-\frac{W(\quad + H^2}{4k_z x}\right] + \exp\left[-\frac{W(\quad - H^2}{4k_z x}\right] \right\}.$$

Значення концентрації домішки наведено в таблиці 4.13. Розрахунок виконувався на сітках: 25 х 25 х 25 комірок (сценарій № 1); 45 х 45 х 45 комірок (сценарій №2);

Таблиця 4.13 – Концентрація домішки в різних точках, мг/м^3

Показник	*X*, м			
	1000	2000	3000	4000
C (аналітичний розв'язок)	1,59	0,79	0,54	0,42
C (розрахунок, сценарій №1 / розрахунок, сценарій №2)	1,53 /1,56	0,74 /0,77	0,50 /0,52	0,39 /0,40

Як бачимо з табл. 4.14, маємо задовільне узгодження між аналітичними значеннями та результатами чисельного моделювання.

Задача № 5. Розглядається потік води в гідравлічному лотоку, рис. 4.47 (лабораторія кафедри гідравліки та водопостачання Дніпровського національного університету залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна). Параметри лотока: довжина 150 см, ширина 13 см, висота 14 см.

Рисунок 4.47 – Експериментальний лотік

На ділянці лотока встановлено дві мінігреблі. Між греблями розташована пластина. Витрата води Q визначається об'ємним способом при постійному рівні води в резервуарі, що живить лотік. Середнє (10 вимірювань витрати) значення Q= 202 см^3/с.

У лотік біля першої мінігреблі постійно подавався сольовий розчин. За допомогою вимірювача TDS визначалася концентрація солі біля пластини (на висоті 1 см, на довжині 1см від пластини, точка № 1), а також на тій самій висоті та на довжині 4см від пластини (точка №2).

Рисунок 4.48 –Мінігреблі та пластина в лотоку

У табл. 4.14 наведено значення концентрації солі в точках вимірювання та розрахункові значення концентрації, отримані за допомогою розробленої тривимірної моделі.

Таблиця 4.14– Концентрація домішки в різних точках вимірювання, %

Параметр	Концентрація, експеримент	Концентрація, розрахунок
Точка № 1	87	79
Точка № 2	64	57

Як підтверджує табл. 4.14, ми маємо задовільне узгодження між експериментальними даними та результатами чисельного моделювання.

Задача № 6. Розглядається розрахунок процесу біологічного очищення води в біологічному реакторі, експериментальне дослідження якого здійснено в роботі [80]. Розрахунок здійнюється на базі розробленої камерної чисельної моделі, що використовує модель Monod для визначення ефективності біологічного очищення. Дані для розрахунку [80]: $м_{max} = 0,034$ год$^{-1}$, $K_s = 46,55$ мг·л$^{-1}$, $S_0 = 1000$ мг·л$^{-1}$, $X_0 = 500$ мг·л$^{-1}$, $Y = 0,25$ мг·л$^{-1}$, $K_d = 0,001$ год$^{-1}$.

Нижче в таблиці наведені розрахункові дані, отримані на базі розробленої моделі, які зіставляються з експериментальними даними з роботи [80].

Таблиця 4.15 – Концентрація домішки, мг ·л$^{-1}$

Час, год	Концентрація субстрату, експеримент (розрахунок)	Концентрація мікроорганізмів, експеримент (розрахунок)
4	840 (854)	706 (688)
8	720 (799)	786 (724)
12	440 (496)	920 (789)

Як ми бачимо із цієї таблиці, ми маємо задовільне узгодження між експериментальними даними та результатами розрахунку на базі побудованої моделі.

Висновки до розділу 4

1. Розглянуто практичне використання побудованих чисельних моделей для оцінювання ефективності роботи біологічних реакторів, де здійснюється очищення стічних вод. Усі моделі є багатофакторними та становлять певну ієрархію: «нульвимірні моделі – двовимірні моделі – тривимірні моделі».

2. Результати, отримані на базі розроблених моделей, свідчать про те, що вони дозволяють швидко визначати ті базові параметри, що характеризують ефективність очищення води в біореакторах. Ці параметри необхідні проєктувальникам для прийняття та обґрунтування інженерних рішень щодо інтенсифікації роботи споруд.

3. Отримані дані дозволяють зробити висновок, що за допомогою розроблених моделей є можливість «бачити» структуру поля концентрації субстрату в біореакторі та аналізувати, наскільки ефективно здійснюється процес біологічного очищення стічних вод у різних частинах споруди. На базі цієї інформації проєктувальник може увести додаткові елементи в споруду з метою інтенсифікації процесу очищення.

4. Отримані дані наукових досліджень показують, що за рахунок зміни гідродинаміки потоку в біореакторі можливо підвищити ефективність очищення стічних вод. Така зміна гідродинаміки можлива шляхом використання додаткових пластин, що встановлюються в реакторі.

5. Методом обчислювального експерименту показано, що для керування ефективністю процесу очищення стічних вод у біореакторі можна використовувати точкове впорскування активного мулу в споруду.

6. На підставі наведених результатів обчислювальних експериментів можна зробити висновок, що запропоновані моделі дозволяють на новому якісному та кількісному рівнях виконувати розрахунки реакторів для біологічного очищення стічних вод.

7. Результати верифікації побудованих моделей свідчать про їх адекватність та надійність.

ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі розглянуто вирішення важливого науково-практичного завдання – розробка методів оцінювання ефективності роботи реакторів для біологічного очищення стічних вод. У результаті виконаних досліджень отримано такі результати:

1. На основі системного аналізу існуючих методів розрахунку реакторів для біологічного очищення стічних вод встановлено, що у світі є дефіцит багатовимірних моделей, що дозволяють швидко визначити ефективність роботи біореакторів.

2. Розроблено нові камерні чисельні моделі для оцінювання ефективності роботи біореакторів, що дозволяють досліджувати процес біологічного очищення стічних вод з урахуванням зміни із часом концентрації субстрату, активного мулу, що потрапляють у реактор.

3. Розроблено нові двовимірні чисельні моделі для оцінювання ефективності роботи біореакторів, що дозволяють досліджувати процес біологічного очищення з урахуванням гідродинаміки в біореакторі, масопереносу субстрату, активного мулу без обмежень на форму споруди, де наявний процес окиснення органічних речовин.

4. Розроблено нові двовимірні чисельні моделі для оцінювання ефективності роботи біореакторів з рухомим біоценозом, що дозволяють досліджувати процес біологічного очищення з урахуванням гідродинаміки стічних вод, масопереносу активного мулу, субстрату та рухомих носіїв у реакторі.

5. Розроблено нові тривимірні чисельні моделі для оцінювання ефективності роботи біореакторів, що дозволяють досліджувати процес біологічного очищення з урахуванням гідродинаміки стічних вод у реакторі, масопереносу активного мулу, субстрату. Ці моделі дають можливість оцінювати ефективність роботи біоректорів, що мають додаткові конструктивні елементи у вигляді пластин.

6. Уперше запропоновано підвищувати ефективність роботи біологічних реакторів за рахунок використання в них додаткових елементів, що змінюють напрям руху потоку стічних вод, а також шляхом точкового впорскування активного мулу в потік.

7. Виконано дослідження, що підтвердили адекватність запропонованих методів розрахунку реакторів для біологічного очищення стічних вод.

8. Розроблено методи розрахунку ефективності реакторів для біологічного очищення стічних вод та на їх основі створено програмне забезпечення, яке використовують у ТОВ «Енергосервіс-КР» та в навчальному процесі Дніпровського національного університету залізничного транспорту ім. академіка В. Лазаряна для підготовки студентів, які навчаються за спеціальністю 192 - промислове та цивільне будівництво ОП «Водопостачання та водовідведення».

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Айрапетян Т. С., Телима С. В., Олійник О. Я Моделювання кисневого режиму в біореакторах-аеротенках при очистці стічних вод від органічних забруднень. *Доповіді НАН України*. 2017. № 6. С. 21–27.

2. Аргучинцев В. К., Аргучинцев А. В. Моделирование мезомасштабных гидротермодинамических процессов и переноса примесей в атмосфере и гидросфере региона оз. Байкал. Иркутск : Изд-во Иркутского гос. ун-та, 2007. 255 с.

3. Бабенко С. П. Тонкошаровий елемент удосконаленої конструкції для видалення з води завислих речовин : автореф. дис. на здобуття наук. ступеня канд. техн. наук : спец. 05.23.04 «Водопостачання, каналізація». Харків : ХНУБА, 2014. 22 с.

4. Беляев Н. Н., Долина Л. Ф., Козачина В. А., Лемеш М. В. Численные модели для расчета гидродинамики и массопереноса в системах очистки води. *XIII Міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні і комунікаційні технології на транспорті, в промисловості та освіті»* (Дніпро, 11-12 грудня 2019 р.). Дніпро : ДНУЗТ, 2019. С. 53.

5. Беляев Н. Н., Козачина В. А. Математическое моделирование массопереноса в горизонтальных отстойниках [монографія]. Днепропетровск : Акцент ПП, 2015. 115 с.

6. Беляев Н. Н., Козачина В. А., Лемеш М. В. Информационная система «WASTE-WATERTREATMENT» для оценки эффективности работы очистных сооружений. *Сучасні інформаційні та комунікаційні технології на транспорті, в промисловості і освіті: тези XI Міжнародної науково-практ. конф.* (Дніпро, 13-14 грудня 2017 р.). Дніпро : ДІІТ, 2017. С. 89–90.

7. Біляєв М. М., Козачина В. А., Полубинская О.В. Моделирование процесса осветления воды в отстойниках. *Проблеми та перспективи розвитку залізничного транспорту: 75 Міжнародна науково-*

практична конференція, 14-15 травня 2015 р, м. Дніпро: тези за матеріалами. – Д.: ДНУЗТ, 2015. – С. 313.

8. Беляев Н. Н., Козачина В. А., Лемеш М. В., Стуликов З. Г. Математическое моделирование биологической очистки сточных вод в аэротенках. *Материалы международной научно-технической конференции «Информационные технологии в металлургии и машиностроении»* (Дніпро, 27-29 березня 2018р.). Дніпро, 2018. С. 49.

9. Беляев Н. Н., Козачина В. А., Лемеш М. В., Грабар Я. А. Математические модели в задачах очистки сточных вод. *IV Міжнародна науково-технічна конференція «Комп'ютерне моделювання та оптимізація систем»* (Дніпро, 1-2 листопада 2018 р.). Дніпро : УДХТУ, 2018. С. 37.

10. Беляев Н. Н., Козачина В. А., Лемеш М. В. Информационная система для анализа работы аэротенков. *XII Міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні і комунікаційні технології на транспорті, в промисловості та освіті»* (Дніпро, 12-13 грудня 2018 р.). Дніпро : ДНУЗТ, 2018. С. 128.

11. Беляев Н. Н., Козачина В. А., Лемеш М. В., Кириченко П. С. Компьютерное моделирование очистки сточних вод. *Матеріали V Міжнародної науково-технічної конференції «Комп'ютерне моделювання та оптимізація складних систем»* (Дніпро, 6 – 8 листопада 2019 р.). Дніпро, 2019. С. 22.,

12. Беляев Н. Н., Козачина В. А., Лемеш М. В., Кириченко П. С. Математические модели в задачах очистки сточных вод. *Матеріали IX Міжнародної наукової конференції «Ресурс і безпека екплуатації конструкцій, будівель та споруд»* (Харків, 15-16 жовтня 2019 р.). Харків : ХНУБА, 2019. С. 5.

13. Беляев Н. Н., Нагорная Е. К. Математическое моделирование массопереноса в отстойниках систем водоотведения [монографія]. Днепропетровск : Нова ідеологія, 2012. 112 с.

14. Беляев Н. Н., Козачина В. А. CFD моделирование процесса формирования осадка в горизонтальном отстойнике. *Науковий вісник будівництва.* 2015. №3 (81). С. 222–225.

15. Беляев Н. Н., Козачина В. А. CFD моделирование работы горизонтального двухэтажного отстойника с поворотом потока в вертикальной плоскости. *Збірник наукових праць Нац. гірн. ун-ту.* 2014. №45. С. 152–157.

16. Беляев Н. Н., Козачина В. А. CFD моделирование работы горизонтального отстойника со струенаправляющими пластинами. *Вода та водоочисні технології. Науково-технічні вісті.* 2014. №2 (15). С. 50–55.

17. Біляєв М. М., Козачина В. А., Лемеш М. В., Кіріченко П. С. Моделювання очистки води в системах «аеротенк – відстійник». *East European Scientific Journal.* 2019. Vol 10(50). P. 10–15.

18. Бертокс П., Радд Д. Стратегия защиты окружающей среды от загрязнений. Москва : Мир, 1980. 606 с.

19. Бойко Т. В., Жежерун Я. В. Алгоритмізація розрахунку біологічного очищення стічних вод в аеротенках. *Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях і системах сталого розвитку*. 2019. С. 290–293.

20. Бомба А. Я., Сафоник А. П. Математичне моделювання процесу аеробного очищення стічних вод в пористому середовищі. IV Міжнародна конференція «Обчислювальна та прикладна математика», 9 -10 вересня, 2011. –К. : КНУ ім. Т. Шевченка. - С. 47.

21. Василенко А. И., Василенко А. А. Проектирование канализации населенных мест. Київ : Будівельник, 1985. 136 с.

22. Василенко О. А., Епоян С. М., Смірнова Г.М., Корінько І.В., Василенко Л.О., Айрапетян Т.С. Водовідведення та очистка стічних вод міста. Курсове і дипломне проектування. Приклади та розрахунки : навчальний посібник. Київ, Харків : КНУБА, ХНУБА, ТО Ексклюзив, 2012. 540 с.

23. Водовідведення і очищення стічних вод міста : навчальний посібник / [С. М. Епоян, Г. М. Смірнова, І. В. Корінько, С. П. Пашкова, В. Ю. Сорокіна, Г. Вевелєр]. Харків : Вид. група «РА Каравела», 2003. 144 с.

24. Водоотведение и очистка сточных вод : учебник для вузов / [С. В. Яковлев, Я. А. Карелин, Ю. М. Ласков, В. И. Калицун]. Москва : Стройиздат, 1996. 591 с.

25. Водопостачання та очистка природних вод : навчальний посібник / С. М. Епоян, В. Д. Колотило, О. Г. Друшляк, Г. І. Сухоруков, Т. С. Айрапетян. Харків : Фактор, 2010. 192 с.

26. Горносталь С. А., Петухова Е. А., Уваров Ю. В. Повышение эффективности работы сооружений биологической очистки городских сточных вод : монография. Харьков : НУГЗУ, 2015. 102 с.

27. Грицина О.О., Волощук В.А., Бляшина М.В., Жукова В.С. Дослідження температурних режимів очищення стічних вод системи первинний відстійник – аеротенк- вторинний відстійник.- Х.: ХНУБА, ХОТВ АБУ, 2017. -.-Т. 90, №4. –С.171 – 175.

28. Гуревич М. И. Теория струй идеальной жидкости. Москва : Наука, 1979. 536 с.

29. ДБН В.2.5-75:2013. Каналізація. Зовнішні мережі та споруди. Основні положення проектування, Київ, 2013. 128 с.

30. Душкин С.С. Благодарная Г. И. Разработка научных основ ресурсосберегающих технологий подготовки экологически чистой питьевой воды. Харьков : ХНАГХ, 2009. 95 с.

31. Епоян С. М., Сухоруков Д. Г. До розрахунку горизонтального відстійника з пористою полімербетонною перегородкою систем господарсько-питного водопостачання. *Науковий вісник будівництва.* 2012. Вип. 68. С. 244–248.

32. Епоян С. М., Сухоруков Д. Г. Особливості роботи пористої полімербетонної перегородки водопровідного горизонтального відстійника і її регенерація. *Науковий вісник будівництва.* 2012. Вип. 69. С. 327–331.

33. Закон України «Про Загальнодержавну цільову програму «Питна вода України» на 2006-2020 роки»: офіц. текст прийнятий Верх. Радою України 3 березня 2005 р.: із змінами та доп. станом на 13 листопада 2011 р. URL: http://zakon4.rada.gov.ua/laws/show/2455-15/paran15#n15 (дата звернення: 3.03.2021).

34. Канализация / С. В. Яковлев, Я. Л. Карелин, А. И. Жуков, С. К. Колобанов. Москва : Стройиздат, 1975. 632 с.

35. Карагяур А. С. Дослідження впливу конструктивних параметрів контактної камери на ефективність перемішування озону з водою. *Науковий вісник будівництва.* 2008. Вип. 47. С. 241–244.

36. Карагяур А. С., Сыроватский А. А., Бабенко С. П. Тонкослойный отстойник с усовершенствованными устройствами подвода-отвода воды *Науковий вісник будівництва.* 2011. Вип. 65. С. 349–353.

37. Карелин Я. А., Жуков Д. Д., Журов В. Н., Репин Б. Н. Очистка производственных сточных вод в аеротенках. Москва : Стройиздат, 1973. 223 с.

38. Кичигин В. И. Моделирование процессов очистки воды : учебное пособие. Москва : Изд-во АСВ, 2003. 230 с.

39. Ковальчук В. А. Очистка стічних вод : навчальний посібник. Рівне : ВАТ «Рівненська друкарня», 2002. 622 с.

40. Козачек А. В., Авдашин И. М., Лузгачев В. А. Исследование математической модели процесса аэробной очистки сточных вод как стадия оценки качества окружающей среды. *Вестник ТГУ*. 2014. Т. 19, вып. 5. С. 1683–1685.

41. Козачина В. А. Моделирование процесса массопереноса в отстойнике при импульсной подаче примеси. *Науковий вісник будівництва.* 2015. №1 (79). С. 162–165.

42. Колесник В. П., Вильсон В. Е. Современное развитие технологических процессов очистки сточных вод в комбинированных сооружениях. Ростов-на-Дону : Изд-во «Юг», 2005. 212 с.

43. Корінько І. В., Панасенко Ю. О. Інноваційні технології водопідготовки. Харків : ХНАМГ, 2012. 208 с.

44. Ласков Ю. М., Воронов Ю. В., Калицун В. И. Примеры расчетов канализационных сооружений. Москва : Высшая шк., 1981. 237 с.

45. Лемеш М. В., Біляєв М. М., Татарко Л. Г., Якубовська З. М. Моделювання біологічного очищення стічних вод на базі камерних моделей. *Наука та прогрес транспорту.* 2020. № 3 (87). С. 16–24. *(Видання включено до міжнародної наукометричної бази Index Copernicus)*

46. Лемеш М. В., Козачина В. А., Гончаров В. В., Поляков А. А., Рекунович А. С. Повышение эффективности очистки сточных вод – как инструмент защиты водоемов от загрязнения. *Науковий симпозіум «Тиждень еколога –2019»* (Кам'янське, 7 -10 жовтня 2019 р.). Кам'янське : ДДТУ, 2019. С. 110 -111.

47. Логачев И. Н., Логачев К. И. Аэродинамические основы аспирации. Санкт-Петербург : Химиздат, 2005. 659 с.

48. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. Москва : Наука, 1978. 736 с.

49. Марчук Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды / Г. И. Марчук. – Москва : Наука, 1982. – 320 с.

50. Методика инженерного расчета вторичных вертикальных отстойников / [А. Я. Олейник, С. К. Киселев, В. Ф. Малько, О. Н. Ягодовская]. *Проблеми водопостачання, водовідведення та гідравліки* : науково-техн. зб. 2006. № 7. С. 65–82.

51. Олейник А. Я., Ягодовская О. М., Маслун Г. С. Расчеты аэротенка-смесителя вместе с вертикальным вторичным отстойником. *Проблеми водопостачання, водовідведення та гідравліки*: науково-техн. зб. 2009. №13. С. 49–62.

52. Олійник О. Я., Айрапетян Т. С. Теорія і розрахунки біологічної очистки стічних вод в аеротенках зі зваженим(вільноплаваючим) і закріпленим на додаткових пристроях біоценозом. *Прикладна гідромеханіка.* 2015. Т. 17, N 3. С. 35–43.

53. Олійник О. Я., Зябліков С. В. Особливості моделювання очистки стічних вод у системі аеротенк-відстійник-регенератор. *Проблеми водопостачання, водовідведення та гідравліки* : Науково-техн. зб. 2006. № 7. С. 65–82.

54. Олійник О. Я., Колпакова О. А. Моделювання і розрахунки біологічної очистки стічних вод на краплинних біофільтрах. *Екологічна безпека та природокористування.* 2014. Вип. 16. С. 68–86.

55. Поляков В. Л. Моделирование биофильтрования воды с ограниченным содержанием органического субстрата. Биореактор-фильтр. *Доповіді НАН України.* 2011. № 7. С. 58–66.

56. Полянин А.Д., Вязьмин А.В., Журов А.И., Казенин Д.А. Справочник по точным решениям уравнений тепло – и массопереноса. М.: Факториал, 1998, 368с.

57. Реконструкция и интенсификация сооружений водоснабжения и водоотведения / [А. А. Василенко, П. А. Грабовский, Г. М. Ларкин и др.]. Киев – Одесса : КНУСА, ОГАСА, 2007. 307 с.

58. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. Москва : Мир, 1980. 616 с.

59. Саблій Л. А. Моделювання процесів очищення стічних вод в біореакторах з іммобілізованими мікроорганізмами. *Вісник Національного університету водного господарства та природокористування.* 2011. Вип. 4(56). С. 83–90.

60. Самарский А. А. Теория разностных схем. Москва : Наука, 1983. 616 с.

61. Сафоник А. П., Клепач М. І., Таргоній І. М. Дослідження та автоматизація реакторів біологічного очищення стоків при контролі

концентрації кисню. *Радіоелектроніка, інформатика, управління*. 2017. № 3. С.192 –197.

62. Сафоник А. П., Таргоній І. М., Лакус П. О. Моделювання та дослідження процесу біологічної очистки води з урахуванням температурного режиму. *Вісник ЖДТУ*. 2019. № 1 (83). С.115 –125.

63. Современные технологи очистки воды / [В. В. Гончарук, Д. Д. Кучерук, А. О. Самсони-Тодоров, В. Ф. Скубченко]. *Наука та інновації*. 2006. Т. 2, № 5. С. 66–77.

64. Степова Н. Г. Апробація одновимірної математичної моделі, що описує процеси у вторинному відстійнику вертикального типу. *Проблеми водопостачання, водовідведення та гідравліки* : науково-техн. зб. 2009. №13. С. 81–90.

65. Таварткиладзе И. М., Кравчук А. М., Нечипор О. М. Математическая модель расчета ветрикальных отстойников с перегородкой. *Водоснабжение и санитарная техника*. Москва, 2006. № 1, ч. 2. С. 39–42.

66. Теоретические основы очистки воды / [Н.И. Куликов, А.Я. Найманов, Н.П. Омельченко, В.Н. Чернышев]. Донецк : Изд-во «Ноулидж» (Донецкое отделение), 2009. 298 с.

67. Тугай А. М., Орлов В. О. Водопостачання. Київ : Знання, 2009. 735 с.

68. Тугай А. М., Терновцев В. О., Тугай Я. А. Розрахунок і проектування споруд систем водопостачання. Київ : КНУБА, 2001. 254 с.

69. Фізико-хімічні та біологічні методи очистки стічних вод : навчальний посібник / С. М. Епоян, Р. І. Назарова, Л. П. Снагощенко, Ю. М. Данченко, В. А. Андронов, Т. М. Обіженко. Харків : Вид. «Міськдрук», 2012. 452 с.

70. Хоружий П. Д., Хомутецька Т. П., Хоружий В. П. Ресурсозберігаючі технології водопостачання. Київ : Аграрна наука, 2008. 534 с.

71. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде / [М.З. Згуровский, В.В. Скопецкий, В. К. Хрущ, Н.Н. Беляев]. Київ : Наук. думка, 1997. 368 с.

72. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя / пер. с нем. Г. А. Вольперт; ред. пер. с нем. Л. Г. Лойцянский. Москва : Наука, 1974. 711 с.

73. Эпоян С. М., Сыроватский А. А., Бабенко С. П. Моделирование движения суспензии в тонкослойном элементе усовершенствованной конструкции. *MOTROL. Comission of motorization and energetics in agricalture.* 2013. Vol. 15, № 6. P. 43–50.

74. Эпоян С. М., Душкин С. С. Технологические схемы очистки воды, условия их применения. *Науковий вісник будівництва*. 2012. Вип. 69. С. 327–331.

75. Эпоян С. М., Сыроватский А. А., Бабенко С. П. Тонкослойные отстойники усовершенствованной конструкции для отчистки поверхностно-ливневого стока. *Сучасні проблеми охорони довкілля та раціонального використання ресурсів у водному господарстві*: міжнар. науково-практ. конф., 2-6 квітня 2012 р., м. Миргород: тези за матеріалами. Київ : Знання України, 2012. С. 51–53.

76. Alma Mašicґ, Jessica Bengtsson, Magnus Christensson. Measuring and modeling the oxygen profilein a nitrifying Moving Bed Biofilm Reactor. *Mathematical Biosciences*. 2010. 227. P.1–11.

77. Alqahtani, RubayyiTurki. Modeling of biological wastewater treatment : Doctor of Philosophy Thesis / School of Mathematics and Applied Statics, University of Wollongong. 2013. 329 p.

78. Anna Montras Boet. Mathematical modeling and molecular analisys of nitrifying packed bed biofilm reactor : PhD Thesis / UniversitatAutonoma de Barcelona. Barcelona, 2009. 231p.

79. Application and Kinetic Evaluation of upflow Anaerobic biofilm Reactor for Nitrogen Removal from Wastewater / Ali Babaei, et al. *Iranian Journal of Environmental Health Science and Engineering*. 2013. 10:20. P. 8.

80. Bayram T. T., Nuhoglu A., Aladag E. Investigation of biodegradation and growth kinetics of dairy wastewater in a batch reactor. *Bulgarian Chemical Communications*. 2017. Vol. 49, №4. P. 896–900.

81. Biliaiev M. M., Kozachyna V.A. CFD modelling of the water treatment in the horizontal settler. *Вісник Дніпропетровського національного університету. Серія Механіка*. 2014. Вип. 18. С. 146–151.

82. Biliaiev M. M., Kirichenko P. S., Lemesh M. V. Numerical simulation of biological wastewater treatment in aeration tank. *Математичне моделювання*. 2018. №1. С. 28–34.

83. Biliaiev M. M., Gunko E. Yu., Kozachyna V. A. CFD simulation of the water purification in the horizontal settler. *Строительство, материаловедение, машиностроение* : сб. науч. тр. 2014. Вып. 75. С. 25–29.

84. Biliaiev M., Gunko E., Lemesh M. Simulation of Aeration Tank Work. *Collection of Research Papers of National Mining University*. 2018. № 53. С. 230–237.

85. Biliaiev M. M., Kozachyna V. A., Polubynskaya E. V. Investigation of the flow in the horizontal settler with baffle. *Науковий вісник будівництва*. 2014, С. 182–184.

86. Biliaiev M., Mashykhina P., Lemesh M. Simplified model to simulate the aeration tank work. *Collection of Research Papers of National Mining University*. 2018. № 54. С. 330–336.

87. Biliaiev M. M., Kozachyna V. A. New codes for CFD simulation of the water purification in the horizontal settler. *Проблеми водопостачання, водовідведення та гідравліки :* науково-техн. зб. 2014. № 24. С. 16–23.

88. Biliaiev M., Lemesh M. Modeling of Biological Wastewater Treatment on the Basis of Quick-Computing Numerical Model. *Наука та прогрес транспорту*. 2018. 1 (73). С. 15–23.

89. Biliaiev M., Savina O., Lemesh M., Tsurkan V. Biological waste water treatment in aeration tanks. *Collection of Research Papers of National Mining University*. 2018. № 55. P. 325–333.

90. Burger R., Faras S., Nopens Simulation of the secondary settling process with reliable numerical methods . *Watermatex : 8th IWA Symposium on Systems Analysis and Integrated.* Spain, San Sebastian, 2011. P. 21–28.

91. Christopher Goode. Understanding biosolids dynamicsin a moving bed biofilmreactor. *Thesis* / Department of Chemical Engineering and Applied Chemistry University of Toronto, 2010. P. 216.

92. Comparison of one-dimensional secondary settling tank models / B. Holenda, I. Pasztor, A. Karpati, A. Redey. *European Water Management Online. European Water Association (EWA) Journal*. 2006, P. 1-17.

93. Griborio A. Secondary Clarifier Modeling: A Multi-Process Approach: PhD Thesis. New Orleans : University of New Orleans, 2004. 440 p.

94. Herman Helnnes Biological phosphorous removal in a moving bed biofilm reactor : Doctoral Thesis. Trondheim : Norvegian University, 2007. 138 p.

95. Hidayah E. N., Hendriyanto O. Hydrodynamic model of sedimentation and disinfection to predict water quality in water treatment plant. *International Journal of Science, Technology and Society.* 2014. Vol. 2(4). P. 73-77.

96. Holenda B. Development of modeling, control and optimization tools for the activated sludge process : PhD Thesis. Chemical Engineering University of Pannonia, 2007. 155 p.

97. Husham T. Ibrahim, He Qiang, Wisam S. Al-Recabi, Yang Qiqi. Improvements in Biofilm Processess for Wastewater Treatment. *Pakistan Journal of Nutrition*. 2012. 11(8). P. 708–734.

98. Hydrodynamic Behavior of Flow in a Drinking Water Treatment Clarifier / Wen-Jie Yang, Syuan-Jhin Wu, Yu-Hsuan Li, Hung-Chi Liao, Chia-Yi

Yang, Keng-Lin Shin, Rome-Ming Wu. *Computation Fluid Dynamics*. Rijeka : InTech, 2010. P. 405–420.

99. Karol Trojanowicz, Włodzimierz Wójcik . Dimensioning of aerated submerged fixedbed biofilmreactors based on a mathematical biofilmmodel applied to petrochemical wastewater – the link between the oryand practice. URL: http://dx.doi.org/10.4314/wsa.v40i2.14, Availableonwebsitehttp://www.wrc.org.za (Accessed 3.03.2021)

100. Kleine D., Reddy Finite Element Analysis of Flows in Secondary Settling Tanks. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2005, P. 849–876.

101. Li-Ming Chen, Li-He Chai. Mathematical model and mechanisms for biofilm wastewater treatment. *World Journal of Microbiology @Biolotechnology*. 2005. 21. P. 1455–1460.

102. LledoPrades Martell. Computational Fluid Dynamics Techniques for Fixed –Bed Biofilm Systems Modelling: Numerical Simulation and Experimental Characterization : Doctoral Thesis. Manresa, October, 2018. 201 p.

103. Mannina G., Trapani D. Di, Torregrossa M., Viviani G. Modelling of hybrid moving bed biofilmreactors: a pilot plant experiment. *Water Science @ Technologies*. 2007, Vol. 55, № 8–9. P. 237–246.

104. Marques J. J., Souza R. R., Souza C. S., Rocha I. C. Attached biomass growth and substrate utilization rate in a moving bed biofilm reactor. *Brailian Journal of Chemical*. 2008. Vol. 25, No. 4.

105. Meghdad Pirsaheb, Mitra Mohammadi, Abdollahdargahi, Ali Almasi, Marzieh Naderi. Modeling and kinetice valuation of intermitt entaeration bioreactor with continuous flowin hospital wastewater treatment. *Journal of Chemical and Pharmaceutical Sciences.* 2016. 1 JCPS Volume 9 Issue 4.

106. MihaelaIlie, Dan NiculaeRobescu, Gina Ghita. Modelling and Simulation of Organic Matter Biodegradetion Processes in Aeration Tanks with Activated Sludge. *REV. CHIM*. (Bucuresti), 2009. 60, Nr. 5. P. 529–532.

107. Michael Meister, Wolfgang Rauch. Wastewater treatment modelling with smoothed particle hydrodynamics. *Environmental Modelling @ Software*. 2016. 75. P.206–211.

108. Mocanu Catalina Raluca, RazvanMihaillescu. Numerical Simulation o Wastewater Treatment Aeration Processes. *U.P.B. Sci. Bull*., Series D, 2012. Vol.74, Iss.2. P.191–198.

109. Modeling of moving biofilm reactor (MMBR) efficiency on hospital wastewater (HW) treatment: a comprehensive analysis on BOD and COD removal / Shokoohi R., et al. *Int. J. Environ. Technol*. 2017. 14. P. 841–852.

110. Muhammad H. Al-Malack, Gerardo R. Aldana. Biokinetic coefficients of anaerobic immersed membrane bioreactor (AnIMBR) treating dairy waters. *Desaliation and Water Treatment*. 2016. Vol. 57, Iss. 59.

111. Nor Faekan I., Fatihah S. Zawawi Samba Mohamed Kinetic evaluation of partitialy packed upflow anaerobic fixed film reactor treating low strength synthetic rubbere wastewater. *Heliyon*. 2020. 6, e03594???. p.7

112. Peide Sun. Numerical Modeling COD, N and P Removal in a Full – scale WWTP in China. *J. Applied Sci*. 2006. 6(15). P. 3155–3159.

113. Pereda M., Zamarreno J. M. Agent – based modeling of an activated sludge process in batch reactor. *19th Mediterrian Conference on Control and Automation Aquis* , Corfu, Greece, June 20-23, 2011. P.1128 – 1133.

114. Performance, kinetic, and biodegradation pathway evaluation of anaerobic fixed filmfixed bedreactor in removing phthalic acid esters from wastewater / Ehsan Ahmadi, Samira Yousefzadeh, Mohsen Ansari, Hamid Reza, etc. *ScIENTIFIcREPOrTS*. 2017. 7:41020. DOI: 10.1038/srep41020

115. Ramalingam K. Critical modeling parameters identified for 3D CFD modeling of rectangular final settling tanks for New York City wastewater treatment plants / K. Ramalingam, S. Xanthos, M. Gong. *Water Science & Technology*. UK : Alliance House, 2012. Vol. 65(6). P. 1087–1094.

116. Razmi A. M. Experiments and numerical modeling of baffle configuration effects on the performance of sedimentation tanks / A. M. Razmi,

R. Bakhtyar, B. Firoozabadi. *Canadian Journal of Civil Engineering*. Canada: Canadian Science Publishing (NRC Research Press), 7 January, 2013, P. 140–150. https://doi.org/10.1139/cjce-2012-0176

117. Robescu D., Mandiş C., Robescu D. Design Lamellar Secondary Settling Tank Using Numerical Modeling. *U.P.B. Sci. Bull*. Series D. 2010. Vol. 72, Iss. 4. P. 211–216.

118. Robesku Diana, Robesku Dan, MocanuRaluca, Moga Corina. Modeling of attached growth biological wastewater treatment process. *U.P.B.Sci. Bull., Series C*. 2007. Vol. 64, No 4. P. 593–598.

119. Rusten B., Odegaard H., Lundar A. Treatment of dairy wastewater in a novel moving bed biofilm reactor. *Wat. Sci. Tech.* 1992. Vol. 26, No. 3-4. P.703 – 711.

120. ShMardani, Mirbagheri A., Amin M.M., Ghasemian M. Determination of biokinetic coefficients for activated sludge processes of municipal wastewater. *Iran J. Environ. Health Sci. Eng.* 2011. Vol. 8, No.1. P. 25–44.

121. Stefan Kuvendziev, Kiril Lisichkov, Dejan Dimitrovski. Modeling of biological reactor for municipal wastewater treatment. *Zastita Materijala* 52, 2011. broj 4. P. 291–297.

122. Takács I. A dynamic model of the clarification-thickening process / Takács I. *Water Research*. 1991. Vol. 25(10). P. 1263–1271.

123. The Computational Modeling of Baffle Configuration in the Primary Sedimentation Tanks / M. Shahrokhi, F. Rostami, Md Azlin Md Said, Syafalni. *2nd International Conference on Environmental Science and Technology*. Singapore, 2011. Vol. 6. P. 392-396.

124. Tran Ha Quan, Elena Gogina and Tran Van Quang. The biological treatment of laboratory SBR model with biofilm. *MATECWeb of Conferencies* 251, 03029, 2018, IPICSE, 7 p.

125. Vlad C., Sbarciong M., Barbu M., CaramanS.Indirect Control of Substrate Concentration for a Wastewater Treatment Process by Dissolved Oxygen Tracking. *CEAI*. 2012. Vol. 14, No. 1. P. 37–47.

126. Zheng Qiaogeng . Selection and Optimization of Carriers in Biological Wastewater Treatment / Thesis, Nanyang Technological University, 2005.140 p.

ДОДАТОК А
СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації

Статті в наукових фахових виданнях України

1. Biliaiev M., Lemesh M. Modeling of Biological Wastewater Treatment on the Basis of Quick-Computing Numerical Model. *Наука та прогрес транспорту*. – 2018. – № 1 (73). – С. 15–23. *(Видання включено до міжнародної наукометричної бази Index Copernicus)*

2. Biliaiev M., Gunko E., Lemesh M. Simulation of Aeration Tank Work. *Collection of Research Papers of National Mining University*.- 2018. - № 53. – С. 230-237.

3. Biliaiev M.M., Kirichenko P.S., Lemesh M.V.Numerical simulation of biological wastewater treatment in aeration tank. *Математичне моделювання*. – 2018. – №1. - С. 28-34.

4. Biliaiev M., Mashykhina P., Lemesh M. Simplified model to simulate the aeration tank work. *Collection of Research Papers of National Mining University*. – 2018. - № 54. - С. 330-336.

5.Biliaiev M., Savina O., Lemesh M.,Tsurkan V. Biological waste water treatment in aeration tanks //*Collection of Research Papers of National Mining University*. – 2018. - № 55. - P. 325-333.

Стаття у закордонному науковому періодичному виданні:

6. Біляєв М.М., Козачина В.А., Лемеш М.В., Кіріченко П.С.Моделювання очистки води в системах «аеротенк - відстійник».*East European Scientific Journal.* – 2019. – Vol 10(50). – P. 10-15.

Публікації у виданнях, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

7. Беляев Н.Н., Козачина В.А., Лемеш М.В. Информационная система «WASTE-WATERTREATMENT» для оценки эффективности работы очистных сооружений. XI Міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні та комунікаційні технології на транспорті, в промисловості та освіті», 13.12.2017 -14.12.2017, Дніпро, 2017.

8. Беляев Н.Н., Козачина В.А., Лемеш М.В., Стуликов З.Г. Математическое моделирование биологической очистки сточных вод в аэротенках. *Материалы международной научно-технической конференции «Информационные технологии в металлургии и машиностроению»,* 27-29 березня, 2018. Дніпро, 2018.

9. Беляев Н.Н., Козачина В.А., Лемеш М.В., Грабар Я.А. Математические модели в задачах очистки сточных вод. *IV Міжнародна науково-технічна конференція «Комп'ютерне моделювання та оптимізація систем»,* 1-2 листопада 2018р. – Дніпро, УДХТУ – С. 37.

10. Беляев Н.Н., Козачина В.А., Лемеш М.В. Информационная система для анализа работы аэротенков. *XII Міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні і комунікаційні технології на транспорті, в промисловості та освіті»*, 12-13 грудня, 2018р. – Дніпро, ДНУЗТ – С. 128.

11. Беляев М.М., Долина Л.Ф., Козачина В.А., Лемеш М.В. Численные модели для расчета гидродинамики и массопереноса в системах очистки води. *XIII Міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні і комунікаційні технології на транспорті, в промисловості та освіті»,* 11-12 грудня, 2019р. – Дніпро, ДНУЗТ – С. 53.

12. Лемеш М.В., Козачина В.А., Гончаров В.В., Поляков А.А., Рекунович А.С. Повышение эффективности очистки сточных вод – как инструмент защиты водоемов от загрязнения .*Науковий симпозіум «Тиждень еколога -2019»*, 7 -10 жовтня, 2019, Кам'янське, ДДТУ. – С.110 -111с.

13. Беляев Н.Н., Козачина В.А., Лемеш М.В.,Кириченко П.С. Компьютерное моделирование очистки сточних вод. *Матеріали V*

Міжнародної науково – технічної конференції «Комп'ютерне моделювання та оптимізація складних систем», 6 – 8листопада 2019, м. Дніпро, с.22.

14. Беляев Н.Н., Козачина В.А., Лемеш М.В.,Кириченко П.С. Математические модели в задачах очистки сточных вод. *МатеріалиIX Міжнародної наукової конференції «Ресурс і безпека екплуатації конструкцій, будівель та споруд»,*15 -16 жовтня 2019, Харків, ХНУБА. С. 5.

Наукові праці, які додатково відображають наукові результати дисертації

15. Лемеш М.В., Біляєв М.М., Татарко Л.Г., Якубовська З.М. Моделювання біологічного очищення стічних вод на базі камерних моделей // *Наука та прогрес транспорту.* – 2020. – № 3 (87). – С. 16–24. *(Видання включено до міжнародної наукометричної бази Index Copernicus)*

Додаток Б

ВІДОМОСТІ ПРО ВПРОВАДЖЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДОСЛІДЖЕННЯ

Міністерство освіти і науки України
Дніпровський національний університет залізничного транспорту
імені академіка В. Лазаряна

ЗАТВЕРДЖУЮ

Проректор з науково- педагогічної,
економічної роботи, перспективного та
іноваційного розвитку
д.т.н., проф. Радкевич А.В.

«12» 09 2019 р.

АКТ ВПРОВАДЖЕННЯ

результатів дисертаційної роботи Лемеша Максима Вікторовича

Чинним актом підтверджується те, що результати дисертаційної роботи аспіранта Лемеша Максима Вікторовича використовуються в навчальному процесі Дніпровського національного університету імені академіка В. Лазаряна при підготовці студентів, які навчаються за спеціальністю «Будівництво та цивільна інженерія». Матеріали дисертаційної роботи, алгоритми та пакети програм використовуються при проведенні лекційних та практичних занять з дисципліни «Споруди і обладнання водовідведення», що дозволило підвищити ефективність навчального процесу та якість викладання матеріалу при вивченні вказаної дисципліни.

Начальник навчального відділу Л.Є. Андрашко

Зав. каф. «Гідравліка та
водопостачання», д.т.н., проф. М.М. Біляєв

ЗАТВЕРДЖУЮ
Директор ТОВ «Енергосервіс-КР»
Ольферт О.Ю.
«02» 06 2020

АКТ

про впровадження результатів дисертаційної роботи
Лемеша Максима Вікторовича

В дисертаційній роботі Лемеша Максима Вікторовича розроблено нові методи розрахунку аеротенків на базі чисельного інтегрування фундаментальних рівнянь гідродинаміки та масопереносу. Чисельне інтегрування моделюючих рівнянь здійснюється за допомогою сучасних методів розщеплення. На базі розроблених методів створено спеціалізоване програмне забезпечення. Запропоновані методи дозволяють оцінювати ефективність роботи аеротенків з урахуванням їх геометричної форми, процесів біологічної очистки, інтенсивності подачі повітря в споруду, дифузії, конструктивних особливостей споруд. Тобто побудовані методи враховують такі важливі параметри, що не враховуються в існуючих методах, які використовуються для оцінки ефективності роботи аеротенків.

Розроблені методи, пакети програм було використано в ТОВ «Енергосервіс-КР» при виконанні робіт, які пов'язані з реінжинірингом комплексу очисних споруд в м. Кривий Ріг.

директор
ТОВ «Енергосервіс-КР» Ольферт О.Ю.