Министерство науки и высшего образования Российской Федерации Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет» (национальный исследовательский университет) Институт естественных и точных наук Факультет Математика, механика и компьютерные технологии Кафедра вычислительной механики

РАБОТА ПРОВЕРЕНА Рецензент д. ф.-м. н., доцент Заведующий кафедрой МАиМПМ \_\_\_\_\_/В.Л. Дильман \_\_\_\_\_2020 г. ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ Заведующий кафедрой ВМ, д. ф.-м. н., профессор \_\_\_\_\_\_/Ю.М. Ковалев \_\_\_\_\_\_2020 г.

### Математическое моделирование интенсификации массообменных

процессов при биологической очистке сточных вод

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА ЮУрГУ – 03.04.01.2020.306-343.ВКР

Руководитель	
д. фм. н., зав. кафедрой ВМ	
/Ю.М. Ковал	ев
2020 г	`.
Автор работы	
студент группы ЕТ-226	
/О.В. Маршалов	
2020 r	`.
Нормоконтролер	
к.фм.н., доцент кафедры BM	
/Н.Л. Клиначев	a
2020 г	·.

## АННОТАЦИЯ

Маршалов О.В. Математическое моделирование интенсификации массообменных процессов при биологической очистке сточных вод. – Челябинск: ЮУрГУ, ЕТ-226, 62 с., 15 ил., 12 табл., библиогр. список – 37 наим., 1 прил.

В дипломной работе рассмотрена модель биологической очистки сточных вод активным илом, реализован расчёт результатов очистки, произведено сравнение вычисленных при помощи программного комплекса «Matlab» величин с экспериментальными данными. На основе модели предложены способы интенсификации процесса биологической очистки.

# СОДЕРЖАНИЕ

	ВВЕДЕНИЕ	4
1	ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ,,,,,	5
2	ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ	6
3	ПРОЦЕСС БИОЛОГИЧЕСКОЙ ОЧИСТКИ	13
	3.1 Параметры процесса биологической очистки	13
	3.2 Закономерности роста бактериальных культур активного	
	ила	19
4	МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА БИОЛОГИЧЕСКОЙ ОЧИСТКИ	
	СТОЧНЫХ ВОД	23
5	ЯЧЕЕЧНАЯ ДИФФУЗИОННАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ	
	ПРОЦЕССА АЭРОБНОЙ БИОЛОГИЧЕСКОЙ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ	
	ВОД	
		28
6	РЕАЛИЗАЦИЯ ЯЧЕЕЧНОЙ ДИФФУЗИОННОЙ МОДЕЛИ В	
	MATLAB	34
	6.1 Предварительные расчёты для проверки работоспособности мо-	
	дели	37
7	ПРИМЕНЕНИЕ РАЗРАБОТАННОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ	
	ПРОЦЕССА БИОЛОГИЧЕСКОЙ ОЧИСТКИ НА ДАННЫХ ОЧИСТ-	
	НЫХ СООРУЖЕНИЯХ ЗЛАТОУСТОВСКОГО ГОРОДСКОГО ОКРУ-	
	ΓΑ	47
	ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ	52
	СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	53
	ПРИЛОЖЕНИЕ	58

#### **ВВЕДЕНИЕ**

Магистерская работа посвящена решению актуальной научнотехнической задачи: моделированию процесса аэробной биологической очистки сточных вод с целью определения параметров процесса, поддающихся регулированию и влияющих на результат очистки.

Очистка с помощью активного ила является наиболее часто используемой системой биологической очистки сточных вод. Математическое моделирование этого процесса важно для повышения эффективности его очистки и, следовательно, качества сточных вод, сбрасываемых в принимающий водоем. Необходимость моделирования процессов биологической очистки продиктована сложностью натурного моделирования процессов очистки больших объёмов сточных вод и плохой масштабируемостью самого процесса очистки.

Целью магистерской работы «Математическое моделирование интенсификации массообменных процессов при биологической очистке сточных вод» является разработка новой математической модели процесса биологического окисления органического субстрата флокулами активного ила, учитывающей влияние размера флокул ила на результат очистки.

В соответствии с поставленной целью основными задачами исследования являются:

 – разработка математической модели процесса аэробного биологического окисления органических загрязнений;

 – разработка алгоритмов для моделирования процесса аэробной биологической очистки на ЭВМ;

 – экспериментальная проверка соответствия разработанной математической модели реальному процессу аэробной биологической очистки сточных вод;

- анализ разработанной математической модели

### 1. Постановка задачи

Из-за очень сложных и нелинейных характеристик этой биологической системы традиционное математическое моделирование этого процесса довольно проблематично.

Проблемы моделирования процесса очистки:

1) Процесс очистки меняется во времени. Он состоит из множества подпроцессов с сильной динамикой различных масштабов. Масштаб скоростей протекающих при очистке процессов варьируются от секунд до месяцев.

2) Процесс имеет сложную, многопараметрическую природу, с большим количеством входных данных. Переменные процесса часто являются нелинейными и имеют сложные взаимосвязи.

3) Некоторые переменные, такие как БПК (биологическое потребление кислорода), трудно измерить в реальном времени.

4) Нет двух одинаковых систем по очистке сточных вод. Существуют различия в размере и обстоятельствах; характер ввода промышленных отходов зависит от конкретной площадки. Необходимо учитывать климатические различия. [34]

В связи со сложностью изучаемого многокомпонентного процесса математические модели допускают приближённый характер определённых зависимостей, хотя они и учитывают особенности роста и размножения микробов, активность ферментов, старение и действие ингибиторов. [23]

### 2. Обзор литературы

Биологическая очистка может осуществляться как свободно плавающим активным илом в специальных бассейнах – аэротенках, так и при помощи фильтрации стоков сквозь биофильтры.

Моделирование биохимических процессов основано на нескольких основных кинетических уравнениях, описывающих рост бактерий, использование субстрата и эндогенный метаболизм (распад) бактерий, а также гидролиз захваченных органических веществ. За последние полвека было разработано несколько моделей активного ила, описывающих биохимические процессы различным образом.

Достаточно современными моделями для процессов с активным илом считаются модели ASM1 - ASM3, разработанные целевой группой Международной ассоциации по водным ресурсам (IWA). Эти модели включают окисление углерода, нитрификацию, денитрификацию, а ASM2d также описывает биологическое и химическое удаление фосфора.

Active Sluge Model (ASM) включает в себя:

- переменные состояния: к ним относятся различные доли ХПК, биомассы и различных типов питательных веществ, как органических, так и неорганических

- описание динамических процессов: перечисляются различные биологические процессы, которые моделируются, вместе с их формулами

- параметры: переменные, которые описывают обстоятельства биологической системы, такие как скорость роста и распада, коэффициент полунасыщения для гидролиза и т.д. Данные модели развивались и улучшались по мере того, как улучшалось понимание биологических и химических процессов, происходящих в активном иле при очистке сточных вод.

Процессы, моделируемые в ASM №1:

1. Процесс роста аэробной гетеротрофной биомассы. Используется модель Моно. Лимитируется субстратом и кислородом.

2. Процесс роста гетеротрофной биомассы в условиях нехватки кислорода (денитрификация). Используется модель Моно.

3. Процесс аэробного роста автотрофной биомассы (нитрификация).

4. Процесс распада гетеротрофной биомассы.

5. Процесс распада автотрофной биомассы.

6. Процесс образования аммония из растворенного органического азота.

7. Процесс гидролиза медленно разлагаемой органики, сорбированной в активном иле.

8. Процесс гидролиза сорбированного (исправила слово) активным илом азота.

Согласно [30] модель ASM включает в себя следующие параметры:

1. Скорость роста гетеротрофов.

2. Скорость роста гетеротрофов в условиях нехватки кислорода.

3. Максимальная удельная скорость гидролиза

4. Константа полунасыщения для гидролиза.

5. Корректирующий коэффициент для гидролиза в условиях нехватки кислорода.

6. Максимальная удельная скорость роста аутотрофов.

Упрощения и допущения, принятые в модели ASM №1:

1. Постоянная температура.

2. рН постоянный и близок к нейтральному.

3. Постоянные удельные скорости роста (не зависят от времени)

4. Нет лимитирования по азоту и фосфору.

5. Корректирующий коэффициент для гидролиза в условиях нехватки кислорода постоянный.

6. Постоянная удельная скорость нитрификации.

7. Гетеротрофная биомасса гомогенная и неизменная по составу.

8. Поглощение нерастворённой органики илом происходит мгновенно.

9. Гидролиз органики и азота происходит одновременно и с одинаковыми скоростями.

Модели активного ила IWA достаточно сложные и обычно используются в расчётных программах. Наиболее распространенными являются Biowin, GPS-X, WEST, STOAT и Simba.

В работе [27] рассматривается очистка с помощью биологических аэрируемых фильтров, представляющих собой трёхфазные реакторы с фиксированной средой. Авторы разработали эмпирическую модель, основанную на том, чтобы связать такую характеристику сточных вод, как химическую потребность в кислороде (sCOD) на входе и выходе биологических фильтров с высотой реактора. Общая скорость реакции при использовании биофильтров описывается как реакция первого порядка:

$$\frac{dC}{dt} = kC$$

где *С* – концентрация загрязнений, выраженная в химической потребности кислорода (ХПК),

*k* – константа скорости процесса.

В итоге авторы получают зависимость концентрации загрязнений в сточных водах на выходе из биофильтра в виде:

$$C = C_i e^{-\frac{k^* A}{Q C_i^n} H}$$

где *C<sub>i</sub>* – концентрация загрязнений на входе в биофильтр (ХПК),

 $k^*$  - константа биомассы, которая зависит от гидравлических характеристик реактора и объемной нагрузки,

А – площадь сечения реактора,

H – высота реактора,

*n* – константа, зависящая от типа биофильтра,

*Q* – объёмный расход.

Предлагаемая авторами модель достаточно простая, так как не использует кинетические параметры процесса биологической очистки. Она позволяет быстро сравнить эффективность биофильтров различного типа. Но не годится для точного прогнозирования результатов очистки, так как не учитывает зависимость кинетических параметров процесса от условий очистки.

Моделирование процесса очистки свободно плавающим активным илом в аэротенке рассматривается в монографии [9]. Авторы предлагают математическую модель, учитывающую кинетику процесса очистки:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{\mu L}{K_L + L} X - \beta X + k_4 S X + k_2 G X Z - k_1 G^m X$$

$$\frac{dZ}{dt} = \frac{\mu L}{K_L + L} Z - \lambda Z + k_4 S Z - k_2 G X Z + k_1 G^m X$$
$$\frac{dZ}{dt} = \frac{\mu L}{K_L + L} Z - \lambda Z + k_4 S Z - k_2 G X Z + k_1 G^m X$$
$$\frac{dL}{dt} = -\frac{1}{Y} \frac{\mu}{K_L + L} (X + Z) L$$
$$\frac{dS}{dt} = (k_3 - k_4 S) (X + Z)$$

где *X*, *Z*, *S*, *L* – концентрации хлопьев, дисперсных микроорганизмов, продуктов автолиза и загрязнений соответственно,

*µ* - максимальная удельная скорость роста хлопьев,

 $K_L$  – константа полунасыщения по субстрату,

*k*<sub>1</sub> – константа скорости времени диспергации хлопьев,

*k*<sub>2</sub> – константа, характеризующая скорость агрегации хлопьев,

*k*<sub>3</sub> – константа, характеризующая скорость образования продуктов автолиза,

 $k_4$  – константа, определяющая скорость окисления продуктов автолиза,

*Y* – экономический коэффициент.

Авторы предлагают рассматривать активный ил как совокупность двух компонент – хлопьев и дисперсных микроорганизмов. Результаты проверки модели путём сравнения с экспериментальными измерениями, выполненными на очистных сооружениях показали качественное совпадение. Анализ, проведённый с применением критерия Фишера показал, что в рамках проведённого авторами эксперимента, уравнения адекватно описывают процессы биологической очистки в системе «аэротенк – вторичный отстойник».

Авторами работы [15] на основе анализа действующих систем очистки сточных вод, экспериментальных исследований процессов в аэротенке, с учетом стехиометрических соотношений, кинетики ферментативных реакций, массопередачи кислорода разработана адаптивная модель процесса аэробной

биологической очистки сточных вод. Модель представляет собой систему дифференциальных уравнений материального баланса, описывающих динамику изменения концентраций кислорода, активного ила и органических загрязнений.

Активный ил, применяемый для биологической очистки стоков представляет собой сложное сообщество различных видом микроорганизмов и простейших. Ряд моделей учитывают его структуру. Так, например, в работе [11] предложена модель учитывающая динамику двух типов микроорганизмов (автотрофных и гетеротрофных), окисляющих соответствующие типы субстрата. Модель была реализована авторами с помощью языка программирования Python.

Удобство пользования моделями процесса очистки является важным условием при использовании их в учебном процессе. Авторы [37] разработали графический интерфейс для облегчения задачи моделирования систем управления для системы очистки сточных вод на основе системы BSM1 (Benchmark Simulation System №1). Основной целью разработанного симулятора на основе графического интерфейса (GUI) является помощь профессорам университетов в использовании модели процесса очистки. Графический интерфейс позволяет реализовать множество экспериментов в различных климатических сценариях с использованием BSM1 что делает его полезным инструментом для контроля за работой водоочистных сооружений. GUI позволяет наглядно отображать результаты симуляции.

Авторы работы [8] используя уже разработанную математическую модель, описывающую процессы, происходящие в аэротенке, разработали программный продукт в среде математического пакета Maple. Данный программный продукт позволяет имитировать протекание процесса биологической очистки сточных вод в аэротенке, при этом можно изменять значения

расхода сточных вод, поступающих на очистку, концентрацию загрязнений в них, количество точек подачи сточных вод по длине аэротенка.

Выводы по разделу: Анализ литературных источников показывает, что существующие математические модели процесса биологической очистки сточных вод можно разделить по выполняемым ими функциям на модели, предназначенные для использования в учебном процессе, при подготовке специалистов по водоснабжению и водоотведению, и на модели, применяемые на реальных очистных сооружениях для прогнозирования и результатов очистки при изменении каких либо параметров. В соответствии с выполняемой задачей изменяется сложность и точность моделей.

Кроме того, немаловажную роль в удобстве использования модели играют варианты программной реализации. Для реализации моделей применяются различные программные продукты и среды, такие как Matlab, Maple, MathCAD, Python и др.

### 3. Процесс биологической очистки

Процесс биологической очистки основан на способности микроорганизмов использовать для своего питания находящиеся в сточных водах органические вещества (органические кислоты, спирты, белки, углеводы, жиры, углеводороды, фенолы), которые являются для них источником углерода [18]. Необходимый для жизнедеятельности микроорганизмов азот они получают из аммиака, нитратов, аминокислот и др., фосфор и калий – из минеральных солей этих веществ. В процессе питания микроорганизмы получают материал для построения своего тела, вследствие чего происходит прирост массы бактерий, который зависит от химического состава загрязнений.

### 3.1 Параметры процесса биологической очистки

Количество органического вещества, которое подвергается биохимическому разложению присутствующими в воде микроорганизмами, можно охарактеризовать величиной, называемой биохимическим потреблением кислорода (БПК). Так как биомасса микроорганизмов всегда содержит некоторое количество трудноокисляемых веществ, то за конечное время разложению подвергнется лишь часть органического вещества, но не всё его количество. Однако принято считать, что почти полное разложение происходит на 20-е сутки от начала процесса. При этом оперируют понятием БПК<sub>20</sub>. Для характеристики концентрации органического углерода в сточных водах пользуются также значением 5-суточного БПК (БПК<sub>5</sub>). Для бытовых стоков, к примеру, БПК<sub>5</sub>  $\approx$  70% от БПК<sub>20</sub>. Но поскольку полностью процесс окисления органики не происходит и на двадцатые сутки, то величина БПК не может показать ни общего содержания разлагаемого органического вещества, ни содержания азот-аммонийной группы в стоках [16].

Кроме БПК, при анализе содержания стоков оперируют таким понятием, как химическое потребление кислорода (ХПК). ХПК пропорционально пол-

ному количеству органики в сточной воде. ХПК стоков определяют по бихроматной окисляемости, и, как показывает опыт, значение ХПК может приближаться к теоретическому количеству кислорода, необходимого для полного окисления на 90 – 95% [24].

В случае если в стоках присутствуют соединения азота, они в процессе очистки подвергаются химическим превращениям. Микробиологический процесс превращения аммония в нитрит, а затем, и в нитрат, называется нитрификацией. При биологической очистке сточной воды нитрификация протекает либо параллельно с превращением органических веществ, либо как отдельный процесс. Нитрификация очень важна для поддержания определённого уровня кислорода в реках, озёрах и, соответственно, на станциях очистки воды [13].

Биохимическое окисление процесс внутриклеточный; ему предшествуют массопередача загрязнений и перенос веществ через цитоплазматическую мембрану клетки, что в совокупности составляет процесс изъятия. Довольно часто диффузионный перенос накладывает ограничение на скорость биологического окисления [21]. Благодаря значительной поверхности хлопьев ила, основная масса загрязнений, уже через несколько минут контакта активного ила и воды, сорбируется на хлопьях. Для переноса веществ внутрь клетки большинство примесей сточных вод должно быть гидролизовано. Гидролитические экзоферменты располагаются на поверхности бактериальных клеток, что предотвращает потерю продуктов гидролиза в окружающую среду. Высокая гидролазная активность илов обусловлена как ферментами живых клеток, так и гидролазами, попадающими в воду в результате гибели и лизиса микробных клеток. Гидролитическому расщеплению подвергаются и коллоидные, и нерастворимые примеси, а также растворённые вещества, если размер их молекул препятствует переносу через цитоплазматическую мембрану. Благодаря действию экзоферментов на поверхности клеток образуется слож-

ный комплекс исходных веществ, ферментов и продуктов ферментативных реакций [22].

Одновременно с началом переноса веществ через цитоплазматическую мембрану начинаются их метаболические превращения внутри клетки. Процессы окисления веществ в клетке идут значительно медленнее, на них затрачивается обычно несколько часов, в течение которых смесь сточной воды и активного ила аэрируют.

Процесс полной биологической очистки протекает в три стадии. На первой стадии, сразу же после смешения сточных вод с активным илом, на его поверхности происходят адсорбция загрязняющих веществ и их коагуляция (укрупнение частиц несущих органические вещества), причём адсорбция обеспечивается как хемосорбцией, так и биосорбцией с помощью полисахаридного геля активного ила и благодаря огромной удельной площади поверхности ила –  $10^5 \text{ м}^2/\text{кг}$ . Таким образом, на первой стадии очистки, загрязняющие вещества в сточных водах удаляются благодаря механическому изъятию их активным илом из воды и началу процесса биоокисления наиболее легкоразлагающейся органики.

Высокое содержание поступающих загрязняющих веществ способствует на первой стадии высокой кислородопоглощаемости, что приводит к практически полному потреблению кислорода в зонах поступления сточных вод в аэротенках. На первой стадии за 0,5 – 2,0 часа содержание органических загрязняющих веществ, характеризуемых показателем БПК<sub>5</sub>, снижается на 50 – 60%.

На второй стадии полной биологической очистки продолжается биосорбция загрязняющих веществ и идёт их активное окисление экзоферментами (ферментами, выделяемыми активным илом в окружающую среду). Благодаря снизившейся концентрации загрязняющих веществ, начинает восстанавливаться активность ила, которая была подавлена к концу первой ста-

дии очистки. Скорость потребления кислорода на этой стадии меньше, чем в начале процесса, и в воде накапливается растворённый кислород. В случае благополучия второй стадии экзоферментами окисляется до 75% органических загрязняющих веществ, характеризуемых показателем БПК<sub>5</sub>. Продолжительность этой стадии различна в зависимости от состава очищаемых сточных вод и составляет от 2 до 4 часов.

На третьей стадии очистки (эндогенное питание) происходит окисление загрязняющих веществ эндоферментами (внутри клетки), доокисление сложноокисляемых соединений, превращение азота аммонийных солей в нитриты и нитраты, регенерация активного ила. На этой стадии происходит образование полисахаридного геля, выделяемого бактериальными клетками. Скорость потребления кислорода вновь возрастает. Общая продолжительность процесса в аэротенках составляет 6 – 8 часов для бытовых и может увеличиваться до 10 - 20 и более часов при совместной очистке бытовых и производственных сточных вод. Продолжительность третьей стадии, таким образом, составляет от 4 – 6 часов при очистке бытовых сточных вод и может удлиняться до 15 часов [17].

Морфология активного ила рассматривается в работах [31] В данных работах показано что суспензия активного ила взятая со станции очистки сточных вод, расположенной в Бжег-Дольном (Польша) состояла из небольших хлопьев размером менее 10 мкм в пропорции волокнистой и круглой формы с низкой шероховатостью края. Среди хлопьев от 10 мкм до 100 мкм с увеличением диаметра увеличиваются удлинение и шероховатость, а также уменьшается округлость. Хлопья большого диаметра были очень редки. Их размер обычно обусловлен большим присутствием нитчатых бактерий, которые были обнаружены в изобилии в представленных образцах активного ила. В образцах активного ила, отобранных из четырех очистных сооружений, расположенных в Нижнесилезском регионе в Польше, в городах: Кату

Wrocławskie, Kobierzyce, Siechnice и Sobótka активный ил имел наибольшую долю частиц в диапазоне размеров от 40 до 200 мкм (см. рис. 1). Однако частицы размером от 2 до 10 мкм представляют наибольшую долю по распределению частиц. Это означает, что большинство хлопьев, составляющих суспензию активного ила, очень малые хлопья, которые присутствуют в больших количествах и в то же время имеет низкую массу. Наличие огромного количество частиц микронного диаметра может повлиять на процессы, связанные с очисткой сточных вод (рис. 1).



Рис. 1 – Распределение частиц активного ила по размерам (данные работы [31])

Также в работе [31] приводятся микрофотографии хлопка (флокул) активного ила (рис. 2).





Рис. 2 Микрофотографии хлопка (флокул) активного ила [31]

В работе [28] показано, что морфология микробных сообществ может оказать существенное влияние не только на эффективность обработки, но и на эффективность использования энергии в процессе активного ила. В этом исследовании авторы разработали и откалибровали технику анализа изображений для определения основных морфологических параметров, таких как как диаметр хлопка и удельная длина нити (SFL), и обнаружили, что SFL оказывает существенное влияние на размер хлопьев ила, удельное производство внеклеточных полимерных веществ, осаждение, вязкость смешанного раствора и эффективность переноса кислорода. Когда SFL увеличился с  $2,5\cdot10^{-9}$  мм·г<sup>-1</sup> до  $6,0\cdot10^{-9}$  мм·г<sup>-1</sup>, кажущаяся вязкость, нормализованная по концентрации взвешенных веществ в смешанной жидкости, увеличилась на 67%, а эффективность переноса кислорода снизилась на 29%. Длительное время удержания твердых частиц (SRT), составляющее 40 дней, снижает SFL, улучшает характеристики осаждения ила и повышает эффективность переноса кислорода и ловышает эффективность переноса кислорода и с с более короткими СТО на 10 и 20 дней. Полученные данные подчеркивают необходимость оценки микробной морфологии при количественной оценке эффективности обработки и энергетической эффективности процессов с активным илом.

### 3.2. Закономерности роста бактериальных культур активного ила

Для описания закономерностей микробного роста в гетерогенной культуре в течение опыта оценивают изменение концентрации биомассы по сухому веществу. На кривой роста (рис. 3) выделяют несколько участков (фаз развития), каждый из которых характеризуется индивидуальными условиями существования культуры. В каждой фазе клеткам присущи своя скорость размножения, размеры и биохимическая активность.

Фаза I – фаза задержки роста – носит название лаг-фазы (от англ. lag – отставание). В лаг-фазе можно выделить два периода. В первом периоде клетки приспосабливаются к условиям окружающей среды, интенсивно синтезируя адаптивные ферменты. В этот период может наблюдаться очень небольшой прирост биомассы за счёт увеличения размеров клеток. Во втором периоде лаг-фазы скорость роста увеличивается, достигая к концу фазы максимального значения.



Рис. 3 - Закономерности роста статической культуры: 1 – рост культуры во времени; 2 – кривая потребления субстрата.

Фаза II называется экспоненциальной или фазой логарифмического роста. Количество питательных веществ не ограничено. Клетки, в основном молодые и биологически активные, обладают наиболее ярко выраженными видовыми признаками. Удельную скорость роста µ в экспоненциальной фазе определяют из уравнения:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X_0 e^{\mu t} \tag{1}$$

где X и X<sub>0</sub> – концентрация биомассы в моменты времени 0 и t;

*µ* – удельная скорость роста биомассы.

Фаза III – фаза замедления роста. Интенсивность деления клеток падает, так как изменяются условия существования культуры, уменьшается количество питательных веществ, в среде накапливаются токсичные продукты обмена.

Фазы II и III в совокупности образуют фазу изъятия субстрата или фазу очистки. Фаза замедления роста начинается, когда значение  $\frac{dX}{dt}$  начинает уменьшаться.

Результаты многочисленных экспериментов показывают, что в течение периода удаления субстрата, когда условия в среде более или менее постоянны, экономический коэффициент также остаётся неизменным.

Фаза IV носит название стационарной фазы роста. Основная причина её наступления – истощение запаса питательных веществ, что хорошо показано на рис. 3. Плато на кривой роста соответствует нижней точке на кривой удаления субстрата. Если клетки, находящиеся на начальной стадии стационарного роста, перенести в среду, богатую питательными веществами, может начаться экспоненциальный рост культуры без лаг-фазы. Но чем дольше микроорганизмы остаются без источников питания, тем больше вероятность нарушения метаболизма клеток, наблюдаемого в стационарной фазе.

Фаза V – экспоненциальная фаза гибели клеток. К началу этой фазы значительная часть клеток ещё живая и использует в качестве источника углерода эндогенные субстраты. Такой процесс называется эндогенным дыханием. Сначала клетки окисляют запасные вещества, затем клеточные липиды, углеводы и, наконец, белки. Самоокисление клеточного вещества приводит к уменьшению биомассы. В фазе V клетки более мелкие, но они устойчивее к физическим и химическим воздействиям окружающей среды. В смешанных культурах в этой фазе возможно взаимодействие разных видов. Например, некоторые клетки могут выделять фермент лизоцим, разрушающий клеточные стенки и мембраны других видов микроорганизмов. Лизис клетки способны вызвать и бактериофаги. Освобождённые органические вещества становятся экзогенным источником углерода для интактных (неповреждённых) клеток.

Наивысшая скорость роста бактерий и наиболее интенсивное потребление ими субстрата наблюдаются именно в экспоненциальной фазе роста. Этой же фазе развития соответствует и максимальная биохимическая активность ила.

Характерная особенность роста популяции микроорганизмов – зависимость удельной скорости роста от параметров окружающей среды. Эта зависимость описывается гиперболической функцией, называемой уравнением Моно [35]:

$$\mu = \mu_m f(L) f(C_{O_2}) f(pH) f(T) f(N) f(P)$$

где  $\mu_m$  – максимальное значение удельной скорости роста;

*L* – концентрация органического субстрата;

C<sub>02</sub> – концентрация растворённого кислорода;

*pH*-щёлочность среды;

Т-температура среды;

*N* – концентрация азот-аммонийной группы;

Р-концентрация ортофосфата.

### 4. Моделирование процесса биологической очистки сточных вод

Моделирование процессов очистки сточных вод достаточно развито. Первым моделям уже около ста лет. Рассмотрим основные результаты, полученные в этой области математического моделирования.

Модели с активным илом можно классифицировать на два класса – фундаментальные и эмпирические. Модели, полученные из механистических уравнения называются фундаментальными моделями. Эмпирические модели определяются на основе данных ввода-вывода системы, где коэффициенты модели подгоняются с использованием статистических методов. [36]

Также, математические модели, описывающие процесс биологической очистки сточных вод можно условно разделить на две группы: не учитывающие и учитывающие влияние концентрации биомассы на скорость биологического окисления. К первому типу относятся модели, описываемые уравнениями типа:

$$\frac{dL}{dt} = f(L) \tag{2}$$

$$\frac{dC}{dt} = b(C_{\mu ac} - C) + \frac{dL}{dt}$$
(3)

где *L* – концентрация органического субстрата,

С – концентрация растворённого в воде кислорода,

*C<sub>нас</sub>* – равновесная концентрация растворённого кислорода, *b* – коэффициент реаэрации.

Введение дополнительной переменной – концентрации микроорганизмов – приводит к моделям второй группы. Модели второго типа описываются системой из трёх уравнений, включающей в себя уравнение (3) и:

$$\frac{dL}{dt} = f(X,L) \tag{4}$$

$$\frac{dX}{dt} = \varphi(X, L) \tag{5}$$

где *X* – концентрация микроорганизмов.

К таким моделям относится классическая модель Моно в которой у чистой бактериальной культуры на органическом субстрате, при отсутствии ингибиторов роста и в условиях хорошего перемешивания, скорость роста будет пропорциональна концентрации бактерий Х:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X \tag{6}$$

$$\mu = \mu_m \frac{L}{L + K_L},\tag{7}$$

где  $\mu_m$  – максимальное значение удельной скорости роста;

*К*<sub>*L*</sub> – константа полунасыщения по органическому субстрату.

Изменение концентрации органического субстрата (скорость реакции) определяется уравнением:

$$\frac{dL}{dt} = -\frac{\mu_m XL}{Y(K_L + L)},\tag{8}$$

где У – экономический коэффициент.

Модель Герберта развивает модель Моно [29].

$$\frac{dL}{dt} = -\frac{\mu_m \cdot L \cdot X}{K_L + L}, \qquad (9)$$

$$\frac{dX}{dt} = \alpha \cdot \frac{\mu_m \cdot L \cdot X}{K_L + L} - kX , \qquad (10)$$

где *а* – коэффициент усвояемости субстрата;

*k* – константа гибели микроорганизмов.

Модель Герберта основана на формуле Моно для скорости биологического окисления.

Во всех рассмотренных выше моделях предполагается независимость процессов от концентрации растворённого кислорода. Для описания зависи-

мости интенсивности разложения субстрата как функции от концентрации кислорода Ленгмюр [33] предложил формулу

$$q = \frac{a \cdot C}{k_0 + C},\tag{11}$$

где *q* – интенсивность биохимического окисления субстрата микроорганизмом;

 $a, k_0$  – константы, зависящие от вида микроорганизмов и типа субстрата.

Активный ил в таких моделях представлен в виде суспензии микроорганизмов в очищаемых стоках в объёме аэротенка. Модели позволяют учитывать как прирост биомассы активного ила в процессе очистки, так и распад биомассы (лизис).

Пространственная структура активного ила в данных моделях не учитывается. Тем не менее, известно, что активный ил образует так называемые флокулы – частицы, состоящие из микроорганизмов, органических и неорганических веществ. Они склеиваются полимерным веществом, выделяемым бактериями. Размеры флокул определяются как состоянием и разнообразием видов микроорганизмов ила, так и окружающей гидродинамической обстановкой.

Процесс биологической очистки, производимый флокулированным илом отличается от очистки диспергированными микроорганизмами. Размер флокулы, начиная с некоторого критического значения Rkp, становится лимитирующим фактором в процессе потребления органического субстрата флокулой. Чараклис [29] предложил решать вопрос об общем росте и утилизации субстрата в бактериальных флокулах на основе предположений об одномерном переносе и последовательном поглощении субстрата на поверхности бактерии с помощью уравнений кинетики насыщения типа уравнений Моно. Более распространённым подходом к этой проблеме явилась модификация кинетического уравнения для диффузионного торможения. При этом скорость реакции заменяется скоростью массопереноса. Это можно сделать при условии, что она является лимитирующим фактором в процессе окисления органического субстрата. Модели, учитывающие влияние процесса диффузии на скорость биологического окисления, называются диффузионными. Подробно диффузионные модели рассмотрены в [1-7]. Эффективность очистки определяется скоростью окисления органических веществ микроорганизмами, входящими в состав активного ила, которая зависит от скорости доставки органического вещества к поверхности бактериальных клеток. Доставка осуществляется с помощью механизмов молекулярной и конвективной диффузии.

Способность ила к флокуляции, является одной из важнейших характеристик состояния биоценоза. Наличие полисахаридного геля на поверхности бактериальных клеток обуславливает агрегацию микроорганизмов и образование флокул. Структура и биологические свойства хлопьев ила определяют эффективность и качество биологической очистки. При нормально идущих процессах очистки масса активного ила представлена хлопьями с плотностью в среднем 1,1 – 1,37 г/см<sup>3</sup> и размером от 53 до 212 мкм [10]. Бактериальные клетки расположены как внутри, так и на поверхности хлопьев. Кроме того, они могут быть представлены незначительным количеством не связанных с хлопьями одиночными бактериями: палочками, кокками, спирохетами и микроколониями из палочек. Активный ил только в флокулированном состоянии может обеспечивать высокие скорости окисления загрязняющих веществ, и, по существу, качество очищенной воды определяется его способностью к флокуляции [17].

В работе [32] моделируется динамика процессов флокуляции и дефлокуляции активного ила. Результаты показывают, что максимальная скорость разрушения флокул не зависит от градиента скорости, и как эффективность столкновения, так и коэффициент интенсивности разрушения показывают степенную зависимость с градиентом средней скорости; первый уменьшается, а второй увеличивается с ростом среднего градиента скорости. В результате двух конкурирующих процессов устанавливается стационарное распределение флокул активного ила по размерам. При начальном диапазоне размеров флокул 5,5 - 1132 мкм процесс флокуляции достигает стационарных значений примерно через 30 минут.

К недостаткам рассмотренных диффузионных моделей можно отнести их стационарный характер. Применяя данные модели, невозможно получить временную зависимость скорости очистки от параметров процесса. Остаётся неизвестной динамика распределения субстрата внутри флокул активного ила.

## 5. Ячеечная диффузионная математическая модель процесса аэробной биологической очистки сточных вод

Для устранения недостатка диффузионных моделей, нами предложена ячеечная диффузионная модель процесса аэробной биологической очистки сточных вод, описывающая также и процесс нитрификации стоков. Суть ячеечной модели состоит в следующем: при рассмотрении динамики процесса биологической очистки, производимого хлопьями ила можно выделить две стадии:

- диффузионный перенос органических веществ к поверхности хлопьев;

 – диффузионный перенос органических веществ внутри хлопьев к поверхности бактериальных клеток.

Рассматривается элементарная ячейка, состоящая из частицы ила сферической формы радиусом  $R_1$ , пограничного слоя радиусом  $R_2$  и объёма сточных вод радиусом  $R_3$ . Элементарная ячейка изображена на рис. 4.

При разработке ячеечной математической модели введены следующие допущения:

 коэффициенты диффузии считаем постоянными на протяжении всего процесса;

 вне пограничного слоя градиент концентрации отсутствует ввиду активного перемешивания.

Процесс поглощения и переработки флокулой органического субстрата можно описать уравнением нестационарной диффузии, которое в сферической системе координат имеет вид:



$$\frac{\partial L_1}{\partial t} = \frac{D_1}{r^2} \left( 2r \frac{\partial L_1}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2 L_1}{\partial r^2} \right) - \mu \frac{X}{Y}, (t > 0, 0 < r < R_1),$$
(12)

где L<sub>1</sub> – массовая концентрация органического субстрата внутри флокулы,

*D*<sub>1</sub> – коэффициент молекулярной диффузии органического вещества
 внутри флокулы,

*r* – радиальная координата.

Величина  $\mu \frac{X}{Y}$  представляет собой скорость потребления органического субстрата в объёме флокулы в соответствии с моделью Моно, причём

$$\mu = \mu_m \frac{L_1}{L_1 + K_L} \cdot \frac{N_1}{N_1 + K_{L,N}},$$
(13)

где *K*<sub>*L*</sub> – константа полунасыщения по субстрату,

*N*<sub>1</sub> – массовая концентрация аммония в стоках,

*K*<sub>*L,N*</sub> – константа полунасыщения по аммонию для процесса потребления органического субстрата.

Процесс нитрификации, происходящий во флокулах, также можно описать уравнением нестационарной диффузии:

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} = \frac{D_{1,N}}{r^2} \left( 2r \frac{\partial N_1}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2 N_1}{\partial r^2} \right) - \mu_N \frac{X_N}{Y}, (t > 0, 0 < r < R_1),$$
(14)

где  $D_{1,N}$  – коэффициент молекулярной диффузии азота внутри флокулы,

*X<sub>N</sub>* – концентрация автотрофной биомассы во флокуле.

Величина  $\mu_N \frac{X}{Y}$  представляет собой скорость потребления аммония в объёме флокулы в соответствии с моделью Моно, причём

$$\mu_{N} = \mu_{Nm} \frac{N_{1}}{N_{1} + K_{N}}, \qquad (15)$$

где  $\mu_{Nm}$  – максимальное значение скорости потребления аммония,

*К*<sub>*N*</sub> – константа полунасыщения по аммонию.

Влияние концентрации растворённого кислорода на скорости потребления органики и азот-аммонийной группы можно учесть, добавив в уравнения (13) и (15) множитель  $\frac{C_{02}}{C_{02} + K_{02}}$ , где  $C_{02}$  – концентрация растворённого кислорода в сточной воде,  $K_{02}$  – константа полунасыщения по кислороду. При этом необходимо будет учесть скорость процесса диффузии кислорода внутрь флокулы:

$$\frac{\partial C_{02}}{\partial t} = \frac{D_{1,02}}{r^2} \left( 2r \frac{\partial C_{02}}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2 C_{02}}{\partial r^2} \right) - \mu_{02} \frac{X}{Y}, (t > 0, 0 < r < R_1),$$
(16)

В пограничном слое происходит молекулярная диффузия органического субстрата и аммония к поверхности флокулы. Соответствующие уравнения молекулярной диффузии имеют вид:

$$\frac{\partial L_2}{\partial t} = \frac{D_2}{r^2} \left( 2r \frac{\partial L_2}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2 L_2}{\partial r^2} \right), (t > 0, R_1 < r < R_2),$$
(17)

$$\frac{\partial N_2}{\partial t} = \frac{D_{2,N}}{r^2} \left( 2r \frac{\partial N_2}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2 N_2}{\partial r^2} \right), \quad (t > 0, R_1 < r < R_2), \quad (18)$$

где  $D_2$ ,  $D_{2,N}$  – коэффициенты молекулярной диффузии органического вещества и азота в пограничном слое,

*L*<sub>2</sub>, *N*<sub>2</sub> – массовая концентрация органического субстрата и аммония в пограничном слое.

В объёме сточной воды, составляющем третий слой элементарной ячейки, распределение концентрации органического вещества определяется двумя видами диффузии: молекулярной и конвективной. Соотношение между этими видами диффузии характеризуется числом Пекле [21]:

$$Pe = \frac{Ud}{D_3},\tag{19}$$

где U – скорость частицы относительно среды;

*d* – линейный размер частицы.

Гидродинамическая обстановка в аэротенке приводит к тому, что в третьей области элементарной ячейки преимущественную роль в распределении концентрации органического субстрата и аммония играет конвективная диффузия. Так как скорость конвективной диффузии много больше скорости молекулярной диффузии, то градиенты концентрации органического субстрата и аммония в третьем слое ячейки можно считать равными нулю.

Влияние числа Пекле на динамику процесса очистки рассмотрено в работе [14].

Граничные и начальные условия для уравнений (12), (14), (16) – (18) примем в виде:

$$D_{1} \frac{dL_{1}(R_{1})}{dr} = D_{2} \frac{dL_{2}(R_{2})}{dr}, \ D_{1,N} \frac{dN_{1}(R_{1})}{dr} = D_{2,N} \frac{dN_{2}(R_{2})}{dr},$$

$$L_{1}(R_{1}) = L_{2}(R_{2}), \ N_{1}(R_{1}) = N_{2}(R_{2}),$$

$$L_{2}(R_{2}) = L_{3}, \ N_{2}(R_{2}) = N_{3},$$

$$L_{1}(0) = 0, \ L_{2}(0) = L_{p}, \ L_{3}(0) = L_{p},$$

$$N_{1}(0) = 0, \ N_{2}(0) = N_{p}, \ N_{3}(0) = N_{p}.$$
(20)

Уравнения (12)–(18), при использовании граничных условий (20), позволяют рассчитать профиль концентрации органического субстрата внутри ячейки в любой момент времени и определить количество потреблённого флокулой органического субстрата и аммония.

Уравнения (12) и (18) решались методом конечных разностей с использованием конечно-разностных аппроксимаций производных [20] вида:

$$\frac{dL}{dt} = \frac{1}{h} [L(u\Delta r, (n+1)h) - L(u\Delta r, nh)],$$

$$\frac{dL}{dr} = \frac{1}{2\Delta r} [L((u+1)\Delta r, nh) - L((u-1)\Delta r, nh)],$$

$$\frac{d^2L}{dr^2} = \frac{1}{(\Delta r)^2} [L((u+1)\Delta r, nh) - 2L(u\Delta r, nh) + L((u-1)\Delta r, nh)].$$
(21)

Для аппроксимации дифференциальных уравнений разностной схемой введены обозначения функции в узлах с индексами  $L(u\Delta r, nh) = L_u^n$  и  $N(u\Delta r, nh) = N_u^n$ .

После некоторых преобразований, уравнения, описывающие процесс потребления органического субстрата примут вид:

$$L_{l_{u}}^{n+1} = \gamma_{1} \left( \frac{u+1}{u} \right) L_{l_{u+1}}^{n} + \beta_{1} L_{l_{u}}^{n} + \gamma_{1} \left( \frac{u-1}{u} \right) L_{l_{u-1}}^{n},$$

$$L_{2_{u}}^{n+1} = \gamma_{2} \left( \frac{u+1}{u} \right) L_{2_{u+1}}^{n} + \beta_{2} L_{2_{u}}^{n} + \gamma_{2} \left( \frac{u-1}{u} \right) L_{2_{u-1}}^{n},$$

$$\Gamma \square \mathbf{e} \quad \gamma_{1} = \frac{D_{1}h}{(\Delta r)^{2}},$$

$$\gamma_{2} = \frac{D_{2}h}{(\Delta r)^{2}},$$

$$\beta_{1} = 1 - \frac{2D_{1}h}{(\Delta r)^{2}} - \frac{\mu_{m}h}{(L_{1_{u}}^{n} + K_{L})} \cdot \frac{N_{1}}{(N_{1_{u}}^{n} + K_{L,N})} \cdot \frac{X}{Y},$$

$$\beta_{2} = 1 - \frac{2D_{2}h}{(\Delta r)^{2}}.$$
(22)

Начальные и граничные условия для данного процесса примут вид:

$$L_{1j}^{0} = 0,$$

$$L_{2j}^{0} = L_{3},$$

$$L_{1f}^{i} = \frac{D_{2}L_{2f+1}^{i} + D_{1}L_{1f-1}^{i}}{D_{1} + D_{2}}.$$
(23)

Система уравнений, описывающих процесс потребления аммония, примет вид:

$$N_{1u}^{n+1} = \gamma_{1,N} \left( \frac{u+1}{u} \right) N_{1u+1}^{n} + \beta_{1,N} N_{1u}^{n} + \gamma_{1,N} \left( \frac{u-1}{u} \right) N_{1u-1}^{n},$$

$$N_{2u}^{n+1} = \gamma_{2,N} \left( \frac{u+1}{u} \right) N_{2u+1}^{n} + \beta_{2,N} N_{2u}^{n} + \gamma_{2,N} \left( \frac{u-1}{u} \right) N_{2u-1}^{n}.$$

$$= \frac{D_{1,N} h}{u}.$$
(24)

где  $\gamma_{1,N} = \frac{D_{1,N}h}{(\Delta r)^2},$ 

$$\gamma_{2,N} = \frac{D_{2,N}h}{(\Delta r)^2},$$
  
$$\beta_{1,N} = 1 - \frac{2D_{1,N}h}{(\Delta r)^2} - \frac{\mu_{Nm}h}{(N_{1u}^n + K_N)} \cdot \frac{X_N}{Y},$$
  
$$\beta_{2,N} = 1 - \frac{2D_{2,N}h}{(\Delta r)^2}.$$

Начальные и граничные условия для процесса нитрификации примут вид:

$$N_{1j}^{0} = 0,$$

$$N_{2j}^{0} = N_{3},$$

$$N_{2f}^{i} = \frac{D_{2,N} N_{2f+1}^{i} + D_{1,N} N_{1f-1}^{i}}{D_{1,N} + D_{2,N}}.$$
(25)

Данная разностная схема, описываемая уравнениями (22-25) является разностной схемой Эйлера. Устойчивость решения в схеме Эйлера определяется величиной коэффициента Куранта [19]:

$$K = \frac{2\Delta tD}{(\Delta x)^2} \,. \tag{26}$$

Решение будет устойчивым при выполнении условия

$$K \le 1 \,. \tag{27}$$

Таким образом, величина шагов разностной сетки по времени и радиальной координате выбираются исходя из неравенства (27).

## 6. Реализация ячеечной диффузионной модели в Matlab

Предложенная в работе модель процесса биологической очистки реализована с помощью программного пакета Matlab.

Алгоритм расчёта представлен на рис. 5



Рис. 5 Алгоритм расчёта ячеечной модели в Matlab

Входные параметры модели можно разделить на несколько групп.

Первая группа параметров описывает особенности очищаемых стоков (табл. 1)

Табл. 1 Параметры стоков

N⁰	Наименование	Единицы	Обозначение
		измерения	
1.	Начальная концентрация субстрата в стоках	кг/м <sup>3</sup>	L <sub>0</sub>
	(БПК-5)		
2.	Начальная концентрация соединений азота в	кг/м <sup>3</sup>	N <sub>0</sub>
	стоках		
3.	Объём очищаемых стоков	M <sup>3</sup>	Vs

Вторая группа параметров описывает активный ил (табл. 2).

Табл. 2 Параметры активного ила

N⁰	Наименование	Единицы	Обозначение
		измерения	
1	Концентрация ила в аэротенке	кг/м <sup>3</sup>	ro_i
2	Концентрация нитрифицирующей биомассы в	кг/м <sup>3</sup>	X <sub>N</sub>
	активном иле		
3	Концентрация биомассы во флоккуле активного	кг/м <sup>3</sup>	Х
	ила		
4	Радиус флокулы	М	<b>R</b> <sub>1</sub>
5	Радиус пограничного слоя	М	R <sub>2</sub>

Третья группа входных параметров модели представляет собой физические константы процесса очистки (табл. 3).

## Табл. 3 Физические константы процесса очистки

N⁰	Наименование	Единицы	Обозначение
		измерения	
1	Коэффициент молекулярной диффузии органи-	м <sup>2</sup> /с	D <sub>1</sub>
	ческого субстрата внутри флокулы		
2	Коэффициент молекулярной диффузии органи-	м <sup>2</sup> /с	D <sub>2</sub>
	ческого субстрата в пограничном слое		
3	Коэффициент молекулярной диффузии азота	м <sup>2</sup> /с	D <sub>N1</sub>
	внутри флокулы		
4	Коэффициент молекулярной диффузии азота в	м <sup>2</sup> /с	D <sub>N2</sub>
	пограничном слое		
5	Коэффициент молекулярной диффузии кисло-	м <sup>2</sup> /с	D <sub>01</sub>
	рода внутри флокулы		
6	Коэффициент молекулярной диффузии кисло-	м <sup>2</sup> /с	D <sub>O2</sub>
	рода в пограничном слое		

Четвёртая группа входных параметров модели представляет собой кинетические константы процесса очистки (табл. 4).

Табл. 4 Кинетические константы процесса очистки

			1
No	Наименование	Елиницы	Обозначение
		Единицы	
		измерения	
		-	
1	Максиманиная скорость потребления субстрата	1/0	
1	максимальная скорость потреоления субстрата	1/0	$\mu_{\rm m}$
	флокулой		
	1 5		
2	Manany contract and an and the second data	1/2	
2	максимальная скорость потреоления азота фло-	1/0	$\mu_{ m mN}$
	кулой		
2		$rm/r^3$	V
3	константа полунасыщения по суострату	<b>КГ/М</b>	ĸL
4	Константа полунасышения по азоту	<b>к</b> г/м <sup>3</sup>	KN
·			<b>→</b> N
1			

5	Экономический коэффициент	-	Y

Стабильность расчёта обеспечивается подбором шага по времени по заданному количеству расчётных ячеек N и значению числа Куранта. Расчётная область включает в себя флокулу и пограничный слой.

Шаг по координате:

$$h=\frac{\mathbf{R}_2}{N},$$

Шаг по времени:

$$\tau = \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{h}}{a}, \mathbf{c},$$

где  $a = \frac{2D_{2N}}{h}$  - характерная скорость процесса, зависящая от самого большого значения коэффициента диффузии для области расчёта.

# 6.1. Предварительные расчёты для проверки работоспособности модели

Для того, чтобы убедиться в работоспособности предлагаемой математической модели можно провести ряд расчётов с контролируемым изменением ряда входных параметров. Знание физических и биологических закономерностей процесс очистки позволяет предсказать правильную реакцию модели на изменение входных параметров.

Расчёты велись при значениях входных параметров, указанных в табл. 5.

Табл. 5 Параметры расчёта

Величина	Значение	Величина	Значение
L <sub>0</sub> , кг/м <sup>3</sup>	0,15	ro_i, кг/м <sup>3</sup>	2
N <sub>0</sub> , кг/м <sup>3</sup>	0,04	X <sub>0</sub> , кг/м <sup>3</sup>	3
$V_s, M^3$	10000	X <sub>N</sub> , кг/м <sup>3</sup>	0,4
$D_1, m^2/c$	0,5.10 <sup>-11</sup>	$D_2, m^2/c$	$1 \cdot 10^{-10}$

$D_{N1}, M^2/c$	$0,1 \cdot 10^{-10}$	$D_{N2}, m^2/c$	$1.10^{-10}$
$D_{01}, M^2/c$	$0, 1 \cdot 10^{-10}$	D <sub>02</sub> , м <sup>2</sup> /с	$1.10^{-10}$
μ <sub>m</sub> , 1/сут	4	$\mu_{N_{\rm m}}$ , 1/cyt	0,6
$K_L$ , κγ/m <sup>3</sup>	0,005	K <sub>LN</sub> , кг/м <sup>3</sup>	0,0005
Υ	0,5	K <sub>LO</sub> , кг/м <sup>3</sup>	0,000625
R <sub>1</sub> , мкм	100	R <sub>2</sub> , мкм	1,5 R <sub>1</sub>

# Проверка зависимости результата расчёта степени очистки от количества расчётных ячеек.

Расчёты проводились для флокул размером 100 мкм. Расчётное время 20 минут. Результаты расчёта приведены в табл. 6

Табл. 6 Зависимость результатов расчёта от количества расчётных ячеек

Число										
расчёт-	25	50	75	100	125	150	175	200	225	250
ных яче-	23	50	15	100	123	150	175	200	223	230
ек, N										
% очист-	64,1	52,5	50,0	49,1	46,9	46,6	46,5	45,5	45,4	45,5
ки	8	9	7	3	7	4	8	4	8	3

Результаты расчёта представлены на графике на рис. 6.

Из расчётов видно, что модель не сильно чувствительна к величине N в диапазоне от 150 до 250 расчётных ячеек. При этом время расчёта растёт с увеличением N. Поэтому дальнейшие расчёты будут проводиться при N=150.

Проверка зависимости степени очистки от величины радиуса флокулы Расчёты проводились для флокул размером 100 мкм. Расчётное время 20 минут, количество расчётных ячеек N=150. Результаты расчёта приведены в табл.7

Радиус флокулы, мкм	50	75	100	125	150	175	200
% очистки	66	54	47	42	40	38	36

Табл.7-Зависимость степени очистки от размера флокулы

Результаты расчёта представлены на графике на рис. 7



Рис. 6 – Зависимость результатов расчёта от количества расчётных ячеек



Рис. 7 – Зависимость степени очистки от размера флокулы активного ила

При увеличении размера флокулы, затрудняется доставка органического субстрата к центру флокулы с помощью механизма молекулярной диффузии. Не смотря на то, что с увеличением радиуса, растёт поверхность массопереноса отдельной флокулы, количество флокул при этом уменьшается. Причём площадь поверхности растёт пропорционально  $R^2$ , а количество флокул уменьшается пропорционально  $R^3$ , что в итоге должно привести к ухудшению очистки. Причём степень очистки должна быть обратно пропорциональна радиусу флокулы. Очевидно, что наибольшую степень очистки дадут одиночные бактерии, так как при этом будет самая большая поверхность для массопереноса. Полученные результаты расчётов показывают, что модель правильно реагирует на изменение радиуса флокулы активного ила.

### Распределение органического субстрата внутри флокулы

Рассмотрим распределение органического субстрата внутри флокулы спустя 20 минут после начала процесса очистки при различных значениях

### радиуса флокулы (рис. 9).



Рис. 9 – распределение субстрата внутри флокулы

Из графиков на рис. 9 видно, что при увеличении размера флокулы, микроорганизмы, находящиеся в центральной части флокулы практически не участвуют в процессе биологической очистки.

Также, проведённые расчёты показывают, что процесс диффузии органического субстрата быстро выходит на квазистационарную стадию. Время установления квазистационарного состояния различается для флокул различного размера, но не превышает нескольких минут. Что совпадает с предположением авторов [4] о том, что процесс диффузии органики в бактериальных клетках носит квазистационарный характер. Таким образом, изменение размера флокулы приводит к ожидаемым изменениям в распределении органического субстрата внутри неё.

### Проверка влияния толщины пограничного слоя на степень очистки

Расчёты проводились для флокул размером 100 мкм. Расчётное время 20 минут, количество расчётных ячеек N=150.

Результаты расчёта приведены в табл. 8

Радиус по-	нет	1,1	1,15	1,20	1,25	1,30	1,35	1,40	1,45	1,50
граничного										
слоя, в долях										
от R <sub>1</sub>										
% очистки	75,1	40,1	35,5	31,1	27,9	25,0	22,3	19,8	18,1	16,6

Табл.8 Зависимость степени очистки от толщины пограничного слоя

С увеличением толщины пограничного слоя, возрастает роль диффузионного массопереноса субстрата к поверхности флокулы. Это ограничивает скорость процесса. Поэтому с увеличением пограничного слоя, скорость процесса очистки замедляется. На толщину пограничного слоя влияет гидродинамическая обстановка в аэротенке. Увеличив интенсивность перемешивания, можно уменьшить толщину пограничного слоя.

# Проверка влияния величины максимальной скорости потребления субстрата на степень очистки

Расчёты проводились для флокул размером 100 мкм. Расчётное время 20 минут, количество расчётных ячеек N=150. Результаты расчёта представлены в табл. 9. и рис. 10.

Табл. 9 Зависимость степени очистки от скорости потребления субстрата

флокулами

Максимальная ско-	2	3	4	5	6	7	8	9	10
рость потребления,									
μ <sub>m</sub> , 1/сут									
% очистки	16,3	20,3	24,2	27,8	31,1	34,1	36,8	39,3	41,6



Рис. 10 – распределение субстрата внутри флокулы по истечении времени t = 20 мин

Видно, что увеличение скорости потребления увеличивает степень очистки, что соответствует ожидаемому результату.

### Проверка модели с использованием реальных данных

Для оценки качества предлагаемой математической модели процесса биологической очистки сточных вод необходимо сравнить результаты математического моделирования с реальными данными, полученными при биологической очистке сточных вод.

В работе [15] представлены данные, полученные с очистных сооружений ОАО «Нижнекамскнефтехим и результаты расчётов по предложенной авторами математической модели (рис. 11).



Рис.11 - Динамика БПК поступающей и очищенной воды (▲ - экспериментальные данные). Рисунок взят из [15]

Из графиков, изображённых на рис. 11 видно, что используемая авторами математическая модель довольно точно позволяет рассчитать результат очистки сточных вод.

Было принято решение сравнить результаты расчётов, получаемых с помощью предлагаемой в данной магистерской диссертации модели ячеечной модели процесса биологической очистки сточных вод, с результатами, получаемыми авторами [15].

Значения констант и параметров процесса очистки подбирались так, чтобы соответствовать значениям этих параметров из работы [15].

Результаты расчёта представлены на рис.12. Из графиков видно, что предлагаемая модель достаточно хорошо соответствует реальному процессу очистки. Единственное отклонение – расчёт номер 7, соответствующий залповому сбросу загрязнённых стоков. Представленные расчёты велись при неизменных кинематических параметрах процесса очистки, что, конечно же, не соответствует действительности. При резком изменении состава стоков, произойдёт и изменение параметров активного ила и очистных сооружений. Если повторить расчёты, регулируя такие параметры, как максимальная скорость потребления органического субстрата активным илом, концентрация растворённого кислорода в стоках, экономический коэффициент, то резуль-



таты расчёта изменяться.

Рис. 12 Сравнение с моделью, предложенной в [15].

### Выводы по разделу:

Проведённые расчёты показали, что предложенная математическая модель адекватно реагирует на изменения параметров процесса. Изменения результатов расчёта согласуются с физическими и биологическим закономерностями процесса биологической очистки. Рассматриваемая в магистерской диссертации ячеечная модель достаточно хорошо описывает процесс биологической очистки и может быть использована для прогнозирования результатов работы очистных сооружений с целью оперативного регулирования их деятельности.

По результатам анализа математической модели можно вынести ряд предложений, которые могут привести к интенсификации процесса биологической очистки сточных вод.

**Во-первых**, уменьшение размера флокул, должно привести к ускорению процесса биологического окисления органики за счёт включения в процесс очистки большего числа микроорганизмов, находящихся внутри флокулы. Причём размер флокул должен соответствовать исходной концентрации органического субстрата в сточной воде и, одновременно, обеспечивать осаждение флокул во вторичном отстойнике.

**Во-вторых**, уменьшение размера флокул приведёт к уменьшению толщины пограничного слоя при сохранении характера гидродинамической обстановки в аэротенке. Это также должно положительно сказаться на скорости и качестве очистки сточных вод от органических загрязнений.

Не менее важным является процесс нитрификации, производимым флокулами активного ила. На скорость нитрификации также влияет размер флокул. Кроме того, величина концентрации аммонийного азота влияет на скорость биологического окисления органики. Поэтому, важным является контролирование величины концентрации аммонийного азота в стоках и поддержание её на уровне, обеспечивающим наиболее полную очистку от органических загрязнений. 7. Применение разработанной математической модели процесса биологической очистки на данных очистных сооружениях Златоустовского городского округа

Очистные сооружения канализации (ОСК) Златоустовского городского округа построены для очистки канализационных стоков производственного и хозяйственно-бытового происхождения. Производственные сточные воды отличаются значительным содержанием легко окисляемых органических соединений. Неокисляемые загрязнения удаляются механическим способом с использованием решёток, песколовок и первичных отстойников. Растворённые же и мелкодисперсные загрязнения удаляются путём биологического окисления.

Биологическая очистка осуществляется в двух аэротенках, объёмом около 2,5 тыс. м<sup>3</sup> каждый. Аэротенки работают в параллельном режиме. Выходя из аэротенков, стоки попадают во вторичные отстойники, где происходит осаждение активного ила. Со дна отстойника активный ил собирается илососами и по трубопроводу возвратного ила подаётся в регенератор аэротенка.

Аэрирование воды в аэротенках осуществляется посредством продувания воздуха с помощью воздуходувок по плетёным трубам, имеющим большие отверстия, проложенным по дну аэротенков. Расход воздуха на аэрацию составляет около 5 тыс. м<sup>3</sup>/час. На каждый аэротенк работает одна воздуходувка мощностью 150 кВт.

Аэротенки коридорного типа, то есть работают по типу идеального вытеснения. Каждый аэротенк имеет три коридора. Основная масса стоков поступает во второй коридор. Первый коридор отдан под регенерацию возвратного активного ила. Возвратный ил подаётся в аэротенк из вторичных отстойников через резервуар возвратного ила. Схема комплекса биологической очистки представлена на рис. 13. Подача воды из аэротенков в отстойники и



Резервуар возвратного ила

Рис. 13. Схема сооружений биологической очистки на ОСК Златоустовского городского округа

дальше осуществляется самотёком с использованием естественного перепада рельефа.

В табл. 10 и на рис. 14 представлены усреднённые значения БПК<sub>20</sub> сточных вод до и после биологической очистки за период с февраля по июль (данные предоставлены Златоустовскими очистными сооружениями канализации).

Месяц	До очистки, мг БПК <sub>20</sub> /л	После очистки, мг БПК <sub>20</sub> /л
февраль	42,4	4,4
март	31,6	4,9
апрель	66,5	5,3
май	61,9	3,8
июнь	52,1	3,3
июль	59,0	3,4

Табл. 10 Загрязнённость стоков до и после очистки на Златоустовских ОСК



Рис. 14. Динамика годового изменения концентрации органических загрязнений в стоках г. Златоуста

По данным табл. 10 видно, что нагрузка на активный ил на Златоустовских городских очистных сооружениях в течение года достаточно низкая. Присутствуют колебания концентрации загрязнений. Следовательно, должен происходить процесс полного биологического окисления органических загрязнений и нитрификация. Ячеечная модель позволяет учитывать влияние нескольких факторов на ход процесса биологической очистки. К этим факторам относятся концентрация азот-аммонийной группы и органического субстрата в стоках, объём активного ила. Кроме того, скорость процесса биологического окисления в ячеечной модели регулируется кинетическими константами аэробной гетеротрофной конверсии.

Так как значения кинетических констант определяются для данных условий в виде интервала значений, то необходима настройка параметров ячеечной модели для обеспечения соответствия, получаемых с помощью неё результатов реальным значениям. Значения используемых параметров приведены в табл. 11. Средний размер флокул ила примем равным 100 мкм. Среднюю толщину пограничного слоя вокруг флокулы примем равной половине радиуса флокулы ( $R_2 = 1,5R_1$ ). Результаты расчёта приведены в табл. 12 и на графике на рис. 15

Таблица 11 Значения кинетических констант

Параметр	Величина	Параметр	Величина
D <sub>1</sub> , м <sup>2</sup> /с	$0, 1 \cdot 10^{-10}$	D <sub>2</sub> , м <sup>2</sup> /с	$1 \cdot 10^{-10}$
D <sub>1</sub> ,N, м <sup>2</sup> /с	$0, 1 \cdot 10^{-10}$	D <sub>2</sub> ,N, м <sup>2</sup> /с	$1 \cdot 10^{-10}$
$\mu_{\rm m}, {\rm cyr}^{-1}$	4 - 8	$\mu_{\rm Nm},  {\rm cyr}^{-1}$	0,3-0,7
Y	0,3 - 0,6	N <sub>p</sub> , кг/м <sup>3</sup>	0,02 - 0,04
$K_L$ , кг/м <sup>3</sup>	0,005 - 0,03	$K_{L,N}$ , кг/м <sup>3</sup>	$3 \cdot 10^{-4} - 7 \cdot 10^{-4}$

аэробной гетеротрофной конверсии и физических параметров процесса

Таблица 12 Результаты расчётов процесса очистки

Параметр	Концентрация органического субстрата, мг БПК <sub>20</sub> /дм <sup>3</sup>						
Номер расчёта	1	2	3	4	5	6	
До очистки	42,4	31,6	66,5	61,9	52,1	59,0	
После очистки	4,4	4,9	5,3	3,8	3,3	3,4	
Расчётное значе- ние	4,53	1,5	17,4	14,5	9,00	12,8	



Рис.15 Результаты очистки, полученные с помощью ячеечной модели (в сравнении с реальными данными)

Полученные результаты позволяют утверждать о работоспособности предлагаемой модели и её соответствии реально происходящим процессам.

### Основные выводы и результаты работы

По результатам проведённого анализа предлагаемой ячеечной модели аэробной биологической очистки сточных вод активным илом можно сделать следующие выводы:

•Модель корректно отображает процессы биологического окисления и нитрификации, что подтверждается схожестью результатов расчёта с реальным значением концентрации органических загрязнений после очистки.

•Алгоритм реализации предлагаемой ячеечной модели в программном продукте Matlab устойчив и позволяет получать адекватные результаты при различных изменениях входных параметров.

•Одним из факторов, влияющих на скорость и качество очистки, является размер флокул активного ила. Уменьшение размеров флокул приводит к увеличению доли потреблённого органического субстрата вне зависимости от величины исходной концентрации органического субстрата в стоках.

•Толщина пограничного слоя, образующегося вокруг поверхности флокулы при её движении в вязкой среде, влияет на скорость доставки органического субстрата к поверхности флокулы. Увеличение толщины пограничного слоя приводит к замедлению скорости очистки и уменьшению доли потреблённого органического субстрата.

• Разработанная ячеечная модель может быть использована на очистных сооружениях для прогнозирования результатов очистки и принятия решений для регулирования процесса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

 Вавилин, В.А. Время оборота биомассы и деструкция органического вещества в системах биологической очистки / В.А. Вавилин. – М.: Наука, 1986. – 144 с.

2. Вавилин, В.А. Математическое моделирование и управление качеством воды / В.А. Вавилин, М.Ю. Циткин // Водные ресурсы. – 1977. – № 5. – С. 114–132.

3. Вавилин, В.А. Математическое моделирование процессов биологической очистки сточных вод активным илом / В.А. Вавилин, В.Б. Васильев. – М.: Наука, 1979. – 119 с.

Вавилин, В.А. Моделирование деструкции органического вещества сообществом микроорганизмов / В.А. Вавилин, В.Б. Васильев, С.В. Рытов.
 М.: Наука, 1993. – 204 с.

5. Вавилин, В.А. Нелинейные модели биологической очистки и процессов самоочищения в реках / В.А. Вавилин. – М.: Наука, 1983. – 159 с.

6. Вавилин, В.А. Обобщенная модель аэробной биологической очистки /
В.А. Вавилин // Водные ресурсы. – 1976. – № 4. – С. 136–148.

7. Вавилин, В.А. Сравнительная оценка математических моделей, применяемых для расчета аэротенков / В.А. Вавилин, В.Б. Васильев. // Водные ресурсы. – 1981. – № 4. – С. 132–145.

8. Волосюк С.В., Горносталь С.А. Имитационное моделирование работы сооружений биологической очистки сточных вод // Проблемы обеспечения безопасности при ликвидации последствий чрезвычайных ситуаций: сб. ст. по материалам всерос. научн.-практ. конф., 21 дек. 2012 / ФГБОУ ВПО Воронежский институт ГПС МЧС России. – Воронеж, 2012. – 380 с.

9. Горносталь С.А., Петухова Е.А., Уваров Ю.В., Повышение эффективности работы сооружений биологической очистки городских сточных вод,
 С.А. Горносталь, Е.А. Петухова, Ю.В.Уваров - Х: НУГЗУ, 2015. – 102 с.

10. Илялетдинов, А.Н. Микробиология и биотехнология очистки промышленных сточных вод / А.Н. Илялетдинов, Р.М. Алиева. – Алма-Ата: Гылым, 1990. – 224 с.

11. Кириллов А.Н., Смирнов Н.В. Компьютерное моделирование и управление процессом биологической очистки сточных вод в аэротенке // Вестник ПНИПУ. Электротехника, информационные технологии, системы управления. 2018. №26. URL: https://cyberleninka.ru/article/n/kompyuternoe-modelirovanie-i-upravlenie-protsessom-biologicheskoy-ochistki-stochnyh-vod-v-aerotenke (дата обращения: 16.06.2020).

 Маршалов, О.В. Интенсификация массообменных процессов при биологической очистке сточных вод: дис. на соиск. ст. канд. техн. наук / О.В. Маршалов. – Москва, 2011. – 167 с.

13 Мешенгиссер, Ю.М. Удаление азота и фосфора активным илом /
 Ю.М. Мешенгиссер, А.И. Щетинин, М.А. Есин // Вода и экология. Проблемы и решения. – 2006. – № 4.

14. Моделирование системы биологической очистки сточных вод на городских очистных сооружениях. Магистерская диссертация. Е.Д. Гирявец, Тольятти 2018

15. Понкратова С. А., Емельянов В. М., Сироткин А. С., Шулаев М. В. Математическое моделирование и управление качеством очистки сточных вод // Вестник Казанского технологического университета. 2010. №6. URL: https://cyberleninka.ru/article/n/matematicheskoe-modelirovanie-i-upravlenie-kachestvom-ochistki-stochnyh-vod (дата обращения: 16.06.2020).

 Поруцкий, Г.В. Биохимическая очистка сточных вод органических производств / Г.В. Поруцкий. – М.: Химия, – 1975. – 253 с.

17. Ротмистров, М.Н. Микробная деструкция синтетических органических веществ / М.Н. Ротмистров, И.И. Гводяк, С.С. Ставская. – Киев: Изд-во «Наукова Думка», 1975. – 224 с.

18. Современные методы интенсификации работы аэротенков на очистных сооружениях больших городов: обзорная информация / В.И. Калицун, В.Н. Николаев, В.Д. Журавлев, М.Г. Картавцева. М.: МГЦНТИ. — 1985. — Вып. 6. — 24 с.

19. Фарлоу, С. Уравнения с частными производными для научных работников и инженеров / С. Фарлоу; пер. с англ. – М.: Мир, 1985. – 384 с.

20. Цыганов, А.В. Моделирование процессов аэробной очистки сточных вод активным илом: дис. на соиск. ст. канд. техн. наук / А.В. Цыганов. – Щёлково, 2005. – 169 с.

21. Чирков, И.М. К вопросу о лимитации роста клетки транспортом веществ через мембрану / И.М. Чирков / Лимитирование и ингибирование роста микроорганизмов: тезисы докладов. – Пущино: НЦБИ, 1989. – С. 166.

22. Шарифуллин, В.Н. Процессы сорбции и биоокисления во флокулах активного ила / В.Н. Шарифуллин, Н.Н. Зиятдинов // Химическая промышленность. – 2001. – № 3. – С. 11–13.

23. Швытов, И.А. Некоторые принципы математического моделирования динамики микробных популяций / И.А. Швытов // Журнал общей биоло-гии. – 1974. – Т. 35. – № 6.

24. Экологическая биотехнология / под ред. К.Ф. Форстера – Л.: Химия, 1990. – 357 с.

25. Юдаев В.Ф., Маршалов О.В., Биглер В.И. Ячеечная модель поглощения субстрата флокулами активного ила//Хранение и переработка с/х сырья. - 2007, - № 11. - С. 66-68.

26. Activated sludge models asm1, asm2, asm2d and asm3. Edited by IWA task group on mathematical modelling for design and operation of biological wastewater treatment: M. Henze, W. Gujer, T. Mino, Mark van Loosdrecht. Published by IWA Publishing, Alliance House, 12 Caxton Street, London SW1H 0QS, UK, 2000 IWA Publishing

27. Allan T. Mann and Tom Stephenson, Modelling Bilogical Aerated Filters
for wastewater treatment, 2nd Symposium on Biological Aerated Filters (BAF2) 12 June 1996, Cranfield University, Cranfield, UK

28. Campbell K, Wang J, Daniels M. Assessing activated sludge morphology and oxygen transfer performance using image analysis. Chemosphere. 2019;223:694-703. doi:10.1016/j.chemosphere.2019.02.088

29. Characklis, W.G. Biofilms / W.G. Characklis, K.A. Marshall. – John Wiley & Sons, New York, N.Y. – 1990, – 800 pp.

30. Jeppsson, U. (1996) Modelling aspects of wastewater treatment processes. PhD thesis (ISBN 91-88934-00-4) Report TEIE-1010, Dept. of Industrial Electrical Eng. and Automation, Lund Institute of Technology., Lund, Sweden.

31. Kuśnierz, M. Scale of Small Particle Population in Activated Sludge Flocs. Water Air Soil Pollut 229, 327 (2018). https://doi.org/10.1007/s11270-018-3979-7

32. Li, Zhenliang & Lu, Peili & Daijun, Zhang & Song, Fuzhong. (2019). Simulation of Floc Size Distribution in Flocculation of Activated Sludge Using Population Balance Model with Modified Expressions for the Aggregation and Breakage. Mathematical Problems in Engineering. 2019. 1-10. 10.1155/2019/5243860.

33. Longmuir, I.S. Respiration rate of bacteria as a function of O2 concentration / I.S. Longmuir // Biochemistry Journal. – 1954, – vol. 57. –  $N_{2}$  1.

34. Modelling Activated Sludge Wastewater Treatment Plants Using Artificial Intelligence Techniques Rabee Rustum, Submitted for the degree of Doctor of Philosophy, Heriot-Watt University, School of the Built Environment, April, 2009

35. Monod, J. Recherches sur la croissance des cultures bacteriennes / J. Monod Paris. – Hermann, 1942

36. Rustum, Rabee. (2009). Modelling activated sludge wastewater treatment plants using artificial intelligence techniques (fuzzy logic and neural networks).

37. Urena, F. & Alfaro, Victor & Arrieta, O. & Vilanova, Ramon. (2011). MATLAB based graphical interface simulator for wastewater treatment plant control by using the benchmark BSM1. 2011 IEEE Global Engineering Education Conference, EDUCON 2011. 585 - 591. 10.1109/EDUCON.2011.5773196.