

УКРАЇНСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ НАУКИ І ТЕХНОЛОГІЙ  
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

УКРАЇНСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ НАУКИ І ТЕХНОЛОГІЙ  
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Кваліфікаційна наукова  
праця на правах рукопису

**ЧІРКОВ АНТОН ОЛЕКСІЙОВИЧ**

УДК 626.86

**ДИСЕРТАЦІЯ**

**УДОСКОНАЛЕННЯ МЕТОДІВ РОЗРАХУНКУ КИСНЕВОГО РЕЖИМУ  
В ОЧИСНИХ СПОРУДАХ ВОДОВІДВЕДЕННЯ**

192 – Будівництво та цивільна інженерія

19 – Архітектура та будівництво

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії.

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



\_\_\_\_\_ А. О. Чірков

Науковий керівник: Біляєв Микола Миколайович, д.т.н., проф.

Дніпро – 2026 р.

## АНОТАЦІЯ

Чірков А. О. Удосконалення методів розрахунку кисневого режиму в очисних спорудах водовідведення. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 192 – Будівництво та цивільна інженерія. – Український державний університет науки і технологій, Дніпро, 2026.

Дисертацію присвячено розробці багатофакторних, швидкорозрахункових CFD (чисельних) моделей, що дають можливість аналізувати та прогнозувати кисневий режим та ефективність біологічного очищення стічних вод в аеротенках.

У **першому розділі** дисертації проведено аналіз наукових публікацій, присвячених проблемі біологічного очищення стічних вод. Результати аналізу показали, що геометрія аераційної системи в аеротенках є ключовим фактором у забезпеченні гідравлічної ефективності та стабільності біологічних процесів. Робота аераторів є найбільш енерговитратним процесом при біологічному очищенні стічних вод. Тому розробка методів, що дозволяють обґрунтувати раціональне розташування аераторів, є особливо важливою задачею. Проведення лабораторних та експериментальних досліджень для аналізу процесів масопереносу активного мулу, субстрату, розчиненого кисню в аеротенках потребують значного часу, коштовного обладнання, кваліфікованих фахівців для обробки результатів вимірювань. Тому вкрай важливим аспектом в області проєктування систем біологічного очищення стічних вод є розробка методів математичного моделювання. Для практики необхідні математичні моделі, що дають можливість врахувати гідродинаміку в очисних спорудах, тому використання камерних (нуль-вимірних) моделей, одновимірних моделей для розрахунку споруд біологічного очищення стічних вод не є ефективним. Важливим аспектом є розробка математичних моделей, що враховують конфігурацію очисних споруд. Наявність таких математичних моделей дає проєктувальникам інструмент для рішення задач по енергетичної

оптимізації систем аерації, що, як відомо, складають основну частку експлуатаційних витрат. Аналіз літературних джерел показав, що використання комерційних CFD (чисельних) моделей потребує значних ресурсів обчислювальної техніки, багато часу на проведення обчислювальних експериментів та значної кількості вхідних параметрів, що не є зручним для щоденного використання таких моделей на практиці. Тому важливим питанням залишається проблема розробки швидкорозрахункових багатофакторних чисельних моделей для щоденного використання на практиці.

У **другому розділі** дисертації розглянуто комплекс математичних моделей для визначення концентраційних полів активного мулу, субстрату, розчиненого кисню та повітряних бульбашок в аеротенках. Запропонована комплексна двовимірна модель для аналізу біологічного очищення стічних вод в аеротенку; модель дає можливість моделювати процес біологічного очищення стічних вод з урахуванням нерівномірного поля концентрації активного мулу, субстрату, розчиненого кисню в споруді; модель «замикається» рівняннями Monod; особливістю моделі біологічного очищення є розрахунок поширення повітряних бульбашок в аеротенку від аератора та врахування переходу кисню від бульбашки до стічних вод.

Запропоновано комплексну тривимірну модель для аналізу біологічного очищення стічних вод в аеротенку; модель дає можливість моделювати процес біологічного очищення стічних вод з урахуванням нерівномірного поля концентрації активного мулу, субстрату, розчиненого кисню в споруді; модель «замикається» рівняннями Monod; особливістю моделі біологічного очищення є розрахунок поширення повітряних бульбашок в аеротенку від аератора та врахування переходу кисню від бульбашки до стічних вод. Запропоновано математичну модель «техногенного» забруднення аеротенку внаслідок емісії пилу в споруду при роботі аератору.

Для рішення задачі гідродинаміки в аеротенку запропоновано використання двох фундаментальних рівнянь механіки суцільного середовища – моделі потенціального руху та рівнянь Ейлера.

Запропоновано математичну модель для рішення задачі по визначенню раціонального місця розташування аератора в аеротенку. Моделюючим рівнянням є спряжене рівняння масопереносу (теорія Г. Марчука). Розглянуто параметри, що потрібні для практичного використання моделей біологічного очищення стічних вод в аеротенках.

В **третьому розділі** дисертації розглянуто розробку двовимірних CFD (чисельних) моделей для визначення в аеротенку концентраційних полів активного мулу, субстрату, розчиненого кисню, повітряних бульбашок, що виходять з аератора; моделі враховують конвективний перенос в аеротенку, процес дифузії, тобто основні гідродинамічні параметри, що впливають на формування концентраційних полів аеротенку.

Розглянуто побудову тривимірних чисельних моделей для визначення в аеротенку концентраційних полів активного мулу, субстрату, розчиненого кисню, повітряних бульбашок, що виходять з аератора; моделі враховують конвективний перенос в аеротенку, процес дифузії, тобто основні гідродинамічні параметри, що впливають на формування просторових концентраційних полів аеротенку.

Розглянуто побудову тривимірної чисельної моделі для рішення задачі гідродинаміки в аеротенку; розрахунок значення потенціалу швидкості здійснюється на базі явної формули, що допускає просту програмну реалізацію чисельної моделі.

Розглянуто побудову двох двовимірних чисельних моделей для рішення задачі гідродинаміки в аеротенку; перша модель базується на чисельному інтегруванні рівняння для потенціалу швидкості, друга – шляхом чисельного інтегруванні рівнянь Ейлера. Особливістю обох чисельних моделей є використання явних формул для визначення невідомих параметрів. Це дає

можливість здійснити просту програмну реалізацію розроблених чисельних моделей гідродинаміки.

Розглянуто побудову чисельної моделі для рішення багатофакторної задачі по визначенню місця раціонального розташування аератору в аеротенку.

Здійснено програмну реалізацію розроблених чисельних моделей. Створені коди являють собою інструмент розрахунку значення потенціалу швидкості на базі явної формули, що допускає просту програмну реалізацію чисельної моделі. Здійснено верифікацію розроблених чисельних моделей; результати верифікації підтвердили адекватність розроблених моделей.

В **четвертому розділі** дисертації наведені результати комплексу обчислювальних експериментів на базі розроблених 2D та 3D CFD (чисельних) моделей. Наведені результати розрахунку концентраційних полів розчиненого кисню, повітряних бульбашок, активного мулу, субстрату в аеротенках складної геометричної форми, при різній конфігурації розташування аераторів. Представлені результати обчислювального експерименту по визначенню концентраційного поля пилу в аеротенку при «техногенному» забрудненню середовища від аератору. Показано приклад рішення задачі по визначенню раціонального місця розташування аератору в аеротенку шляхом використання розробленої моделі на базі спряженого рівняння.

**Ключові слова:** обробка стічних вод, біологічні елементи, аеротенк, субстрат, бульбашки повітря, мікрофлора, аерація, якість води, мул, вдув повітря, масоперенос, гідродинаміка, кисневий режим.

## ABSTRACT

*Chirkov A. O.* Improving Methods for Calculating Oxygen Conditions in Wastewater Treatment Plants – Qualification scientific work on the rights of the manuscript.

The dissertation on competition of a scientific degree of the doctor of philosophy on a specialty 192 – Building Industry and Civil Engineering. – Ukrainian State University of Science and Technologies, Dnipro, 2026.

This dissertation is devoted to the development of multifactorial, fast-computing CFD (numerical) models that enable the analysis and prediction of the aerobic conditions and efficiency of biological wastewater treatment in aeration tanks.

The first chapter of the dissertation analyzes scientific publications devoted to the problem of biological wastewater treatment. The results of the analysis showed that the geometry of the aeration system in aerotanks is a key factor in ensuring hydraulic efficiency and the stability of biological processes. The operation of aerators is the most energy-intensive process in biological wastewater treatment. Therefore, the development of methods to justify the rational arrangement of aerators is a particularly important task. Conducting laboratory and experimental studies to analyze mass transfer processes of activated sludge, substrate, and dissolved oxygen in aerotanks requires significant time, expensive equipment, and qualified specialists to process the measurement results. Therefore, the development of mathematical modeling methods is a crucial aspect of designing biological wastewater treatment systems. For practical applications, mathematical models are needed that allow for the consideration of hydrodynamics within treatment facilities; therefore, the use of chamber (zero-dimensional) models or one-dimensional models for calculating biological wastewater treatment facilities is not effective. An important aspect is the development of mathematical models that account for the configuration of treatment facilities. The availability of such mathematical models provides designers with a tool for solving problems related to the energy optimization of aeration systems, which, as is well known, account for the majority

of operating costs. A review of the literature has shown that the use of commercial CFD (numerical) models requires significant computing resources, a great deal of time for computational experiments, and a large number of input parameters, which is not practical for the daily use of such models in practice. Therefore, the development of fast-computing, multi-factor numerical models for daily practical use remains a critical issue.

The second chapter of the dissertation examines a set of mathematical models for determining the concentration fields of activated sludge, substrate, dissolved oxygen, and air bubbles in aeration tanks. A comprehensive two-dimensional model is proposed for analyzing biological wastewater treatment in an aeration tank; the model allows for simulating the biological wastewater treatment process while accounting for the non-uniform concentration fields of activated sludge, substrate, and dissolved oxygen within the structure; the model is "closed" by Monod equations; a distinctive feature of the biological treatment model is the calculation of the propagation of air bubbles in the aerotank from the aerator and the consideration of oxygen transfer from the bubbles to the wastewater.

A comprehensive three-dimensional model is proposed for analyzing biological wastewater treatment in an aeration tank; the model allows for the simulation of the biological wastewater treatment process, taking into account the non-uniform concentration fields of activated sludge, substrate, and dissolved oxygen within the structure; The model is "closed" by Monod's equations; a distinctive feature of the biological treatment model is the calculation of the propagation of air bubbles in the aeration tank from the aerator and the consideration of oxygen transfer from the bubbles to the wastewater. A mathematical model of "technogenic" contamination of the aeration tank due to dust emissions into the structure during aerator operation is proposed.

To solve the hydrodynamic problem in an aeration tank, we propose using two fundamental equations of continuum mechanics: the potential flow model and Euler's equations.

A mathematical model is proposed for solving the problem of determining the optimal location of the aerator in an aerotank. The governing equation is the conjugate mass transfer equation (G. Marchuk's theory). The parameters required for the practical application of biological wastewater treatment models in aerotanks are discussed.

The third chapter of the dissertation examines the development of two-dimensional CFD (computational) models for determining concentration fields of activated sludge, substrate, dissolved oxygen, and air bubbles emerging from the aerator in an aeration tank; The models account for convective transport in the aeration tank and the diffusion process, i.e., the main hydrodynamic parameters influencing the formation of concentration fields in the aeration tank.

The construction of three-dimensional numerical models for determining concentration fields of activated sludge, substrate, dissolved oxygen, and air bubbles emerging from the aerator in an aerotank is considered; the models account for convective transport in the aeration tank, the diffusion process, i.e., the main hydrodynamic parameters influencing the formation of spatial concentration fields in the aeration tank.

The construction of a three-dimensional numerical model for solving the hydrodynamic problem in an aerotank is considered; the calculation of the velocity potential is performed based on an explicit formula, which allows for a simple software implementation of the numerical model.

The construction of two two-dimensional numerical models for solving the hydrodynamic problem in an aerotank is considered; the first model is based on the numerical integration of the velocity potential equation, the second—on the numerical integration of Euler's equations. A distinctive feature of both numerical models is the use of explicit formulas to determine unknown parameters. This makes it possible to implement the developed numerical hydrodynamic models in a straightforward manner.

The construction of a numerical model for solving a multifactorial problem regarding the determination of the optimal location of an aerator in an aerotank is considered.

The developed numerical models have been implemented in software. The resulting code serves as a tool for calculating the velocity potential based on an explicit formula, which allows for a straightforward software implementation of the numerical model. The developed numerical models have been verified; the verification results confirmed the adequacy of the developed models.

The fourth chapter of the dissertation presents the results of a series of computational experiments based on the developed 2D and 3D CFD (numerical) models. The results of calculations of concentration fields of dissolved oxygen, air bubbles, active sludge, and substrate in aeration tanks with complex geometric shapes are presented, for various configurations of aerator placement. The results of a computational experiment to determine the dust concentration field in an aeration tank under “technogenic” environmental pollution from the aerator are presented. An example of solving the problem of determining the optimal location of the aerator in the aeration tank using a developed model based on a coupled equation is shown.

*Keywords:* wastewater treatment, biogenic element, aerotank, substrate, air bubble, microflora, aeration, water quality, sludge, air jet, mass transfer, hydrodynamics, oxygen regime.

## **СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ**

### **Статті у фахових наукових виданнях України:**

1. Біляєв М. М., Машихіна П. Б., Побєдьонний Р. П., Чірков А. О., Чирва М. В. Математична модель аналізу кисневого режиму в біореакторі. Наука та прогрес транспорту. 2023. № 1 (105). С. 5–12. DOI: 10.15802/stp2024/303085 (особистий внесок: аналіз стану проблеми, розробка чисельних моделей, розробка комп'ютерного коду, проведення обчислювального експерименту, аналіз та обробка даних обчислювального експерименту).

2. Біляєв М. М., Тимошенко О. А., Калашников А. В., Коваленко А. С., Чірков А. О. Аналіз процесів масопереносу на базі чисельних моделей. Український журнал будівництва та архітектури. 2024. № 6 (024). С. 55–63. DOI: <https://doi.org/10.30838/UJCEA.2312.271224.55.1111> (особистий внесок: розробка чисельних моделей, розробка комп'ютерного коду, проведення обчислювального експерименту, аналіз та обробка даних обчислювального експерименту).

3. Biliaiev M. M., Kozachyna V. A., Kyrychenko M. V., Skuratov M. O., Chirkov A. O., Filonenko H. K. Mathematical Models for Water Treatment Problems. Наука та прогрес транспорту. 2025. № 1. С. 5–13. DOI: [10.15802/stp2025/324157](https://doi.org/10.15802/stp2025/324157) (особистий внесок: розробка чисельних моделей, розробка комп'ютерного коду для проведення обчислювального експерименту).

4. Біляєв М. М., Машихіна П. Б., Татарко Л. Г., Чірков А. О., Чирва М. В. Експрес-розрахунок кисневого режиму в очисних спорудах. Український журнал будівництва та архітектури. 2023. № 6 (018). С. 29–34. DOI: [10.30838/J.BPSACEA.2312.261223.29.1004](https://doi.org/10.30838/J.BPSACEA.2312.261223.29.1004) (особистий внесок: аналіз стану проблеми, розробка чисельних моделей, розробка комп'ютерного коду, проведення обчислювального експерименту, аналіз та обробка даних обчислювального експерименту).

5. Biliaiev M. M., Chirkov A. O. Hierarchy of Mathematical Models for Calculating Aeration Tanks. Science and Transport Progress. 2026. № 1(113). P. 17–23. DOI: <https://doi.org/10.15802/stp2026/352713> (особистий внесок: розробка чисельних моделей, розробка комп'ютерного коду для проведення обчислювального експерименту).

### **Праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:**

6. Біляєв М.М., Козачина В.В., Коваленко А.С., Чірков А.О., Чирва М. В. Математичне моделювання процесів масопереносу та гідродинаміки.

Матеріали VII Міжнародної науково-технічної конференції Комп'ютерне моделювання та оптимізація складних систем (Дніпро, 1-3 листопада 2023р.)

C.30. (особистий внесок: розробка чисельних моделей, розробка комп'ютерного коду для проведення обчислювального експерименту, моделювання роботи біореактору).

7. Біляєв М.М., Коваленко А.С., Козачина В.В., Скуратов М.О., Чірков А.О. Математичне моделювання динаміки водних потоків. Тези. XVII Міжнародної науково-практичної конференції «Сучасні інформаційні та комунікаційні технології на транспорт, в промисловості і освіті» Присвячено пам'яті Владислава Скалозуба.(Дніпро, 12.12.2024 – 13.12.2024 рр.) С.112. (особистий внесок: розробка чисельних моделей та комп'ютерних кодів для моделювання роботи аеротенків).

8. Біляєв М.М., Чірков А.О., Чирва М.В., Коваленко А.С. Математичні моделі при розрахунку очисних споруд . Conference proceedings. XIII International scientific and practical conference. A substantive representation of the system of scientific knowledge. (March 27-28 Riga, Latvia) С.75. (особистий внесок: розробка чисельних моделей та комп'ютерних кодів для моделювання роботи аеротенків, проведення обчислювальних експериментів).

9. Козачина В.В., Коваленко А.О., Чірков А.О. Експериментальне та теоретичне дослідження процесів тепломасопереносу. Всеукраїнська науково-технічна конференція студентів і молодих учених «Наука і сталий розвиток транспорту 2024» Дніпро. С.207-208. (особистий внесок: розробка багатофакторних чисельних моделей та комп'ютерних кодів для моделювання роботи аеротенків, проведення обчислювальних експериментів).

10. Побєдзонний Р.П., Чірков А.О. Моделювання нестационарних процесів в очисних спорудах. Всеукраїнська науково – технічна конференція студентів і молодих учених «Наука і сталий розвиток транспорту 2023». Дніпро. С.100-101. (особистий внесок: розробка чисельних моделей та комп'ютерних кодів для моделювання роботи аеротенків, проведення чисельних експериментів).

11. Чірков А.О., Чирва М.В., Коваленко А.С. Моделювання систем очистки стічних вод. Conference proceedings. XI «Implementation of modern scientific opinions in practice» (Bilbao, Spain. March 20-22, 2023) С.262. (особистий внесок: розробка чисельних моделей та комп'ютерних кодів для моделювання роботи аеротенків, проведення чисельних експериментів).

## ЗМІСТ

ВСТУП .....	15
РОЗДІЛ 1 АНАЛІЗ СТАНУ ПРОБЛЕМИ .....	20
1.1 Аеротенки: сучасний стан .....	20
1.2 Аналіз наукових публікації по проблемі біологічного очищення стічних вод .....	30
Висновки до Розділу 1 .....	40
РОЗДІЛ 2 МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ БІОЛОГІЧНОЇ ОЧИСТКИ ВОДИ З УРАХУВАННЯМ ПЕРЕНОСУ РОЗЧИНЕНОГО КИСНЮ .....	42
2.1 2D модель очищення води в аеротенку з урахуванням переносу розчиненого кисню .....	42
2.2 3D математична модель очищення води в аеротенку .....	48
2.3 Модель гідродинаміки .....	51
2.4 Моделюючі рівняння в задачі про визначення раціонального міста розташування аератора .....	52
2.5 Модель потрапляння домішки в аеротенк при роботі аератора .....	57
2.6 Параметри, що необхідні для реалізації моделі роботи аеротенку .....	58
Висновки до Розділу 2 .....	64
РОЗДІЛ 3 ЧИСЕЛЬНІ МОДЕЛІ ДЛЯ ОЦІНЮВАННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ РОБОТИ АЕРОТЕНКУ .....	66
3.1 2D Чисельні моделі масопереносу в аеротенку .....	66
3.2 Чисельна модель поширення пилу від аератора .....	75
3.3 3D Чисельні моделі масопереносу в аеротенку .....	80
3.4 2D Чисельні моделі гідродинаміки для аналізу поля швидкості стічних вод в аеротенку .....	83
3.5 3D Чисельні моделі гідродинаміки для аналізу поля швидкості стічних вод в аеротенку .....	87

	14
3.6 Чисельні моделі рішення задачі про обґрунтування вибору місця розташування аератору в аеротенку.....	89
3.6 Верифікація чисельних моделей.....	97
Висновки до розділу 3 .....	103
РОЗДІЛ 4 МОДЕЛЮВАННЯ ГІДРОДИНАМІКИ ТА МАСОПЕРЕНОСУ В АЕРОТЕНКАХ, ЩО МАЮТЬ СКЛАДНУ КОНФІГУРАЦІЮ.....	105
4.1 Моделювання процесу поширення пилу в аеротенку від аератору.....	105
4.2 Моделювання процесу поширення повітряних бульбашок в аеротенку .....	109
4.3 Моделювання кисневого режиму в аеротенках на базі двовимірних CFD моделей.....	114
4.4 Моделювання кисневого режиму в аеротенках на базі тривимірних CFD моделей.....	130
4.5 Визначення раціонального міста розташування аератору в аеротенку .....	135
Висновки до розділу 4 .....	137
ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ .....	139
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	141
ДОДАТОК А.....	155
ДОДАТОК Б .....	157

## ВСТУП

**Актуальність теми.** Аеротенк є одним з найбільш важливих елементів в технологічних схемах очистки як комунальних, так і промислових стічних вод. При проектуванні аеротенків особливо важливо забезпечити потрібний рівень розчиненого кисню в стічних водах, що проходять обробку. Дана задача вирішується як на етапі проектування аеротенків, так і при реконструкції очисних споруд. Рішення задач даного класу базується, як правило, на використанні методів математичного моделювання. Це пов'язано з тим, що експериментальні методи дослідження багатофакторних процесів в аеротенках потребують значного часу, коштовного обладнання для проведення вимірювань. Прикладні математичні моделі, що використовуються зараз на практиці, не враховують ряд таких важливих параметрів, як конфігурація аеротенків, гідродинаміка, просторове поширення кисню від аераторів. Для підвищення якості проектних робіт дуже важливо мати спеціалізовані комп'ютерні моделі, що дозволяють врахувати найбільш важливі фактори, що мають місце в аеротенках та впливають на формування кисневого режиму, а з іншого боку – дають можливість швидко оцінювати рівень кисню в стічних водах, що проходять обробку. Тому розробка таких спеціалізованих моделей є важливою науковою задачею

### **Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.**

Дисертація виконана в рамках наукових робіт Українського державного університету науки і технологій (УДУНТ) «Розробка математичних моделей для задач водокористування» (0123U105333), «Розробка методів розрахунку динаміки водних потоків та процесів тепломасопереносу» (0123U105334).

**Метою** дисертаційної роботи є розробка багатофакторних, швидкорозрахункових CFD (чисельних) моделей, що дають можливість аналізувати та прогнозувати ефективність біологічного очищення стічних вод в аеротенках з урахування кисневого режиму.

**Задачі дослідження.** Для досягнення поставленої мети були сформульовані та вирішені такі задачі:

- виконано аналіз методів дослідження процесів біологічного очищення стічних вод;
- розроблені 2D CFD (чисельні) моделі для дослідження процесів масопереносу активного мулу, субстрату, розчиненого кисню, повітряних бульбашок в аеротенках;
- розроблені 3D CFD (чисельні) моделі для дослідження процесів масопереносу активного мулу, субстрату, розчиненого кисню, повітряних бульбашок в аеротенках;
- розроблені 2D чисельні моделі гідродинаміки в аеротенках, що дають можливість врахувати їх конфігурацію;
- розроблено 3D чисельну модель гідродинаміки в аеротенках, що дає можливість врахувати їх конфігурацію;
- розроблені чисельні моделі для визначення раціонального місця розташування аератора в аеротенках;
- розроблено 2D чисельну модель поширення пилу, що потрапляє в аеротенк при роботі аератора;
- розроблені комп'ютерні програми для проведення обчислювальних експериментів на базі побудованих CFD моделей;
- здійснено верифікацію побудованих моделей;
- проведено комплекс комп'ютерних експериментів, здійснено обробку та аналіз отриманих результатів.

**Об'єкт дослідження** – процес біологічного очищення стічних вод.

**Предмет дослідження** – методи розрахунку процесу біологічного очищення стічних вод в аеротенках.

**Методи досліджень.** Дослідження процесів гідродинаміки та масопереносу в аеротенках здійснено на базі фундаментальних рівнянь механіки суцільного середовища, що виражають закони збереження маси та імпульсу. Побудову чисельних моделей, що описують процес очищення стічних вод в аеротенках, здійснено на базі кінцево-різницевої схем розщеплення. При узагальненні матеріалів, що присвячені проблемі

біологічного очищення стічних вод, використовувались методи системного аналізу та синтезу.

**Наукова новизна.** Наукова новизна результатів полягає в наступному.

Вперше:

- розроблено 2D швидкорозрахункову CFD модель, що дає можливість комплексно досліджувати концентраційні поля субстрату, активного мулу, розчиненого кисню та повітряних бульбашок в аеротенку з урахуванням його конфігурації;

- розроблено 3D швидкорозрахункову CFD модель, що дає можливість комплексно досліджувати концентраційні поля субстрату, активного мулу, розчиненого кисню та повітря в аеротенку з урахуванням його конфігурації;

- розроблено 2D швидкорозрахункову CFD модель, що дає можливість досліджувати процес формування концентраційного поля пилу, що потрапляє в аеротенк при роботі аератора;

- розроблено чисельну модель, що базується на рішенні спряженого рівняння масопереносу, для обґрунтування раціонального місця розташування аератора в аеротенку.

**Практична цінність.** Практична цінність результатів дисертації полягає в наступному:

1. Розроблені CFD моделі відносяться до класу «operational models» та дають можливість швидко розраховувати концентраційні поля активного мулу, субстрату, розчиненого кисню, повітряних бульбашок в аеротенку для аналізу ефективності його роботи.

2. На базі розроблених CFD моделей створені комп'ютерні програми для проведення обчислювальних експериментів по визначенню ефективності біологічного очищення стічних вод; дані програми являють собою сучасний інструмент рішення комплексу прикладних задач, що виникають на етапі проєктування або реконструкції аеротенків.

3. Особливістю практичної реалізації розроблених CFD моделей є мінімальні вимоги щодо потужності комп'ютерів; час розрахунку одного варіанту задачі складає 3 с.

4. Проведення обчислювальних експериментів на базі розроблених CFD моделей потребує використання стандартної вхідної інформації.

5. Використання розроблених CFD моделей дає можливість зменшити частку експериментальних досліджень в рамках розглянутого наукового напрямку.

6. Побудовані CFD моделі використовуються у навчальному процесі Українського державного університету науки та технологій.

7. Побудовані CFD моделі використовуються у Філії «Проектно-вишукувальний інститут залізничного транспорту» АТ «Українська залізниця».

**Особистий внесок здобувача.** Особистий внесок здобувача в роботах, опублікованих у співавторстві [5, 13, 14, 15, 16, 17, 35, 44, 59, 66, 69], полягає у аналізі стану проблеми, розробці чисельних моделей, розробці комп'ютерного коду, проведенні обчислювальних експериментів, аналізі та обробці даних досліджень.

**Апробація результатів дисертації.** Основні результати наукових досліджень, викладених у дисертаційній роботі, було представлено на всеукраїнських та міжнародних науково-технічних конференціях, зокрема: VII Міжнародна науково-технічна конференція «Комп'ютерне моделювання та оптимізація складних систем» (Дніпро, 2023); XIII International scientific and practical conference «A substantive representation of the system of scientific knowledge» (Riga, Latvia, 2023); Всеукраїнська науково-технічна конференція студентів і молодих учених «Наука і сталий розвиток транспорту 2023» (Дніпро, 2023); XI International Scientific and Practical Conference «Implementation of modern scientific opinions in practice» (Bilbao, Spain, 2023); XVII Міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні та комунікаційні технології на транспорт, в промисловості і освіті» (Дніпро,

2024); Всеукраїнська науково-технічна конференція студентів і молодих учених «Наука і сталий розвиток транспорту 2024» (Дніпро, 2024).

**Публікації.** За темою дисертації опубліковано 11 наукових праць, а саме: 5 – статті у наукових фахових виданнях України категорії Б; 6 – тези доповідей на всеукраїнських та міжнародних конференціях.

**Структура і обсяг дисертації.** Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел і додатків. Робота надрукована на 157 сторінках, з них основного тексту 128 сторінок; містить 75 рисунків, 6 таблиць. Список використаних літературних джерел містить 124 бібліографічних назв. У додатку наведені: список наукових праць, опублікованих за темою дисертації; документи про впровадження результатів дисертаційної роботи.

## РОЗДІЛ 1 АНАЛІЗ СТАНУ ПРОБЛЕМИ

В розділі наводяться результати аналізу літературних джерел, що присвячені проблемі біологічного очищення стічних вод.

### 1.1 Аеротенки: сучасний стан

Очистка води є важливим етапом в системах водокористування [1–4, 13–18, 20–22, 72, 80, 89, 107]. Для очистки води використовуються різні технології та пристрої [24–30, 32–46]. В межах даної проблеми слід окремо визначити використання мікроорганізмів для очистки води [1, 3, 12, 13, 18, 26, 30, 32–35, 37, 39–41, 50, 51, 54, 56, 57, 59, 60, 61, 62, 67, 111, 118, 119, 121–124].

Вперше ідею очистки стічних вод за допомогою мікроорганізмів запропонував англійський хімік Дібдін у 1887 р. Таким чином, основні принципи біохімічного очищення стічних вод були відомі вже наприкінці ХІХ століття. Початок впровадження аераційних споруд припадає на 1914–1916 рр., коли Адерн та Локет надрукували наукові праці, де були систематично викладені принципи біохімічного методу очищення стічних вод. Коридорний аеротенк з пневматичною аерацією Херда почав широко використовуватися на початку 20-х років ХХ століття.

Зараз для біологічного очищення стічних вод використовуються такі споруди:

1. Поля фільтрації.
2. Біофільтри.
3. Циркуляційні окиснювальні канали.
4. Біологічні ставки.
5. Аеротенки (рис. 1.1).

У світі для очищення комунальних та стічних вод від підприємств найбільш широко використовуються аеротенки.

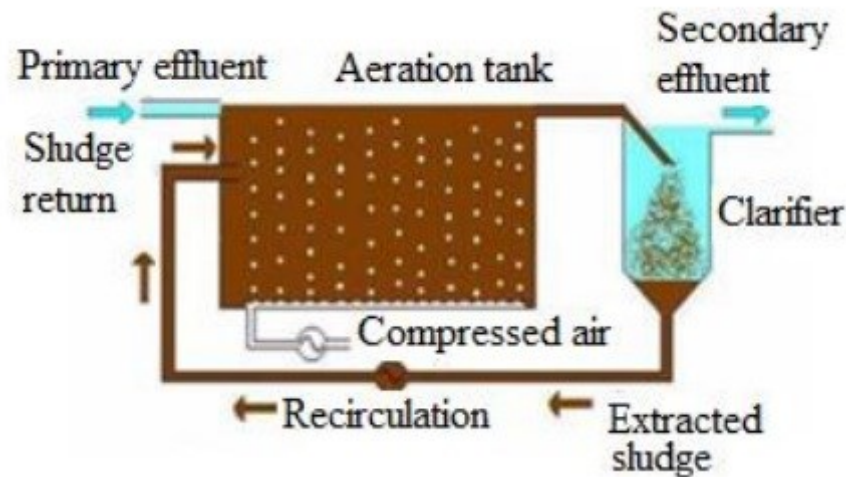


Рисунок 1.1 – Схема аеротенку (Bianca-Ştefania ZĂBAVĂ, et al)

Схема аеротенка, що показана на рис. 1.1, відображає такі процеси:

1. Подача субстрату в очисну споруду.
2. Подача в споруду активного мулу.
3. Подача повітря в аеротенк.
4. Вихід стічної води з аеротенку у вторинний відстійник та

повернення активного мулу з цього відстійника знову в аеротенк.

Зараз існує значна кількість аеротенків, що можуть мати суттєві відмінності один від одного. Але ці очисні споруди можна класифікувати так:

1. За типом руху потоку (pattern) в споруді.
2. За методом аерації (наприклад, з механічною аерацією – рис. 1.2, рис. 1.3, з використанням дифузорів – рис.1.4, комбінована система аерації – рис. 1.5).
3. За конфігурацією (геометричною формою) аеротенка (наприклад, коридорного типу, круглі в плані тощо).
4. За схемою з'єднання аеротенку зі вторинним відстійником.

Забезпечення киснем середовища в аеротенку є задачею особливої відповідальності. Кисень використовується мікроорганізмами для життєдіяльності, а також для реалізації процесу очищення стічних вод. Так, процес окиснення в аеротенку можна записати так:

Органіка+O<sub>2</sub>  $\xrightarrow{\text{мікроорганізми}}$  CO<sub>2</sub>+H<sub>2</sub>O+NH<sub>3</sub>+енергія+інші продукти.

З огляду на важливість забезпечення водного середовища в аеротенку киснем, в світі здійснюється активна розробка систем подачі повітря в аеротенк. Існуючі системи подачі повітря в аеротенки можна класифікувати так:

1. Пневматична аерація (тонке диспергування або створення великих бульбашок).
2. Механічна аерація.
3. Комбінована аерація.

Аерація вважається тонко диспергованою, якщо діаметр повітряних бульбашок не більш ніж 2,5 мм.

Механічна аерація побудована на такому принципі: захоплення повітря з атмосфери за рахунок ротора та перемішування повітря з середовищем аеротенку. В залежності від розташування ротора в рідині, його конструкції, можна класифікувати механічну аерацію наступним чином:

1. За глибиною розташування ротора.
2. За розташуванню осі ротора – горизонтальне або вертикальне.
3. За конструкцією ротора – конічна, дискова, гвинтова тощо.

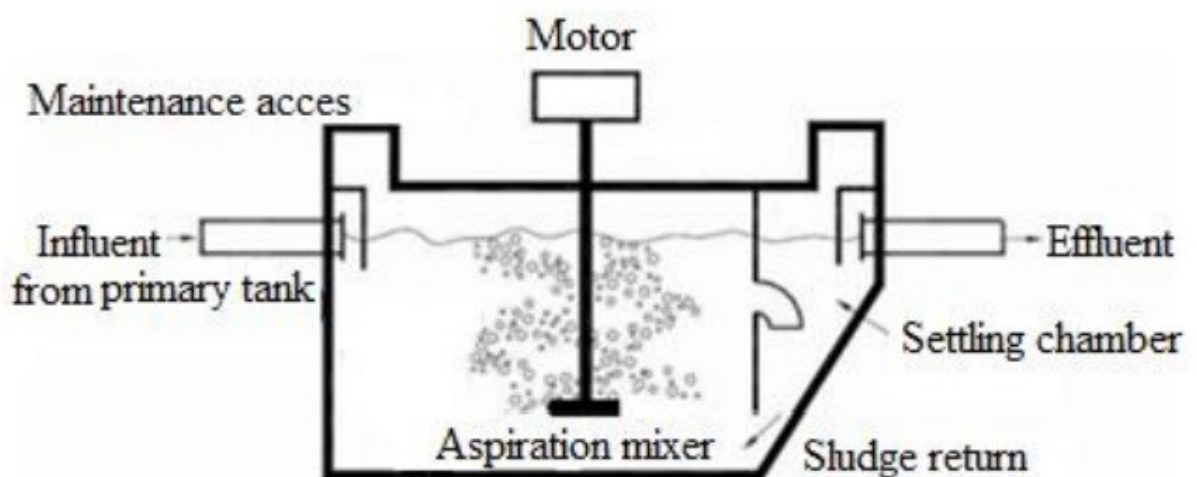


Рисунок 1.2 – Схема механічної аерації аеротенку  
(Bianca-Ştefania ZĂBAVĂ, et al)

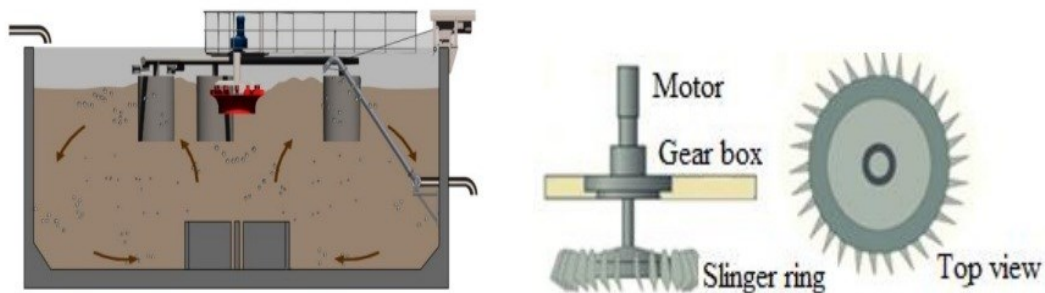


Рисунок 1.3 – Елементи системи механічної аерації аеротенку  
(Bianca-Ştefania ZĂBAVĂ, et al)



Рисунок 1.4 – Використання дифузорів в аеротенку  
[https://www.instagram.com/p/DFfjIVvtrKg/?img\\_index=2](https://www.instagram.com/p/DFfjIVvtrKg/?img_index=2)

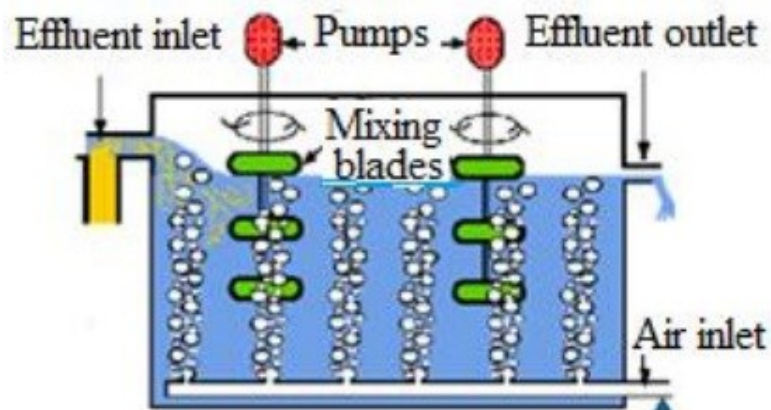


Рисунок 1.5 – Схема комбінованої аерації аеротенку  
(Bianca-Ştefania ZĂBAVĂ, et al)

Аналіз літературних джерел показав, що в світі здійснюється інтенсивна розробка різних видів дифузорів, що створюють різні за розміром повітряні бульбашки (рис. 1.6-1.10), а також має місце розробка інших видів пристроїв, що використовуються для подачі повітря в системи біологічного очищення стічних вод (рис.1.11-1.15). Але слід підкреслити, що для обґрунтування ефективності тієї чи іншої системи аерації для конкретного аеротенку потрібно мати спеціалізовані математичні моделі, що дають можливість прогнозувати концентрацію розчиненого кисню в аеротенку для конкретних умов експлуатації.

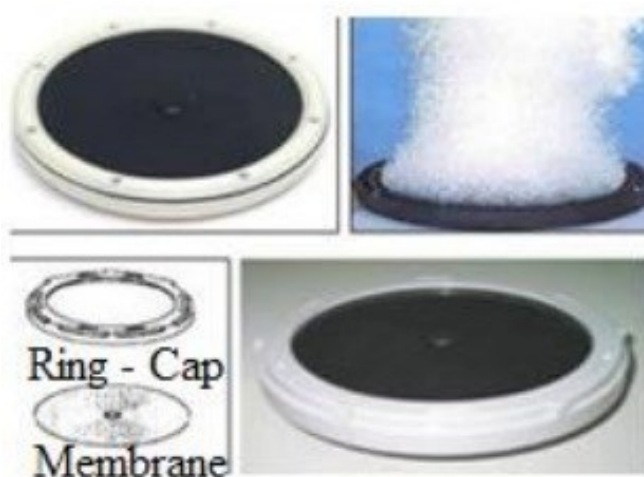


Рисунок 1.6 – Фото дифузорів, що створюють мікробульбашки повітря (Bianca-Ştefania ZĂBAVĂ, et al)



Рисунок 1.7 – Фото дифузорів, що створюють великі за розміром бульбашки повітря (Bianca-Ştefania ZĂBAVĂ, et al)



Рисунок 1.8 – Фото пористого диффузора (Prof. Alberto CUOCI Company  
Supervisor: Dr. Thomas HOEHNE Candidate: Tural MAMEDOV)



Рисунок 1.9 – Фото пористого диффузора (Prof. Alberto CUOCI Company  
Supervisor: Dr. Thomas HOEHNE Candidate: Tural MAMEDOV)



Рисунок 1.10 – Фото дифузора з великими отворами, non-porous (Prof. Alberto CUOCI Company Supervisor: Dr. Thomas HOEHNE Candidate: Tural MAMEDOV)

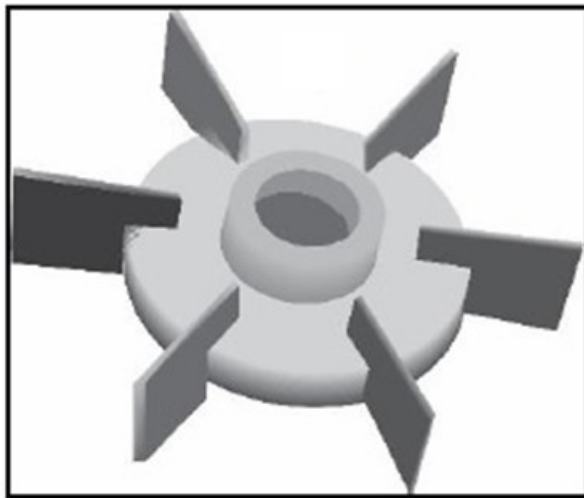


Рисунок 1.11 – Форма імпеллера (Botlagunta, Mahendran et al)

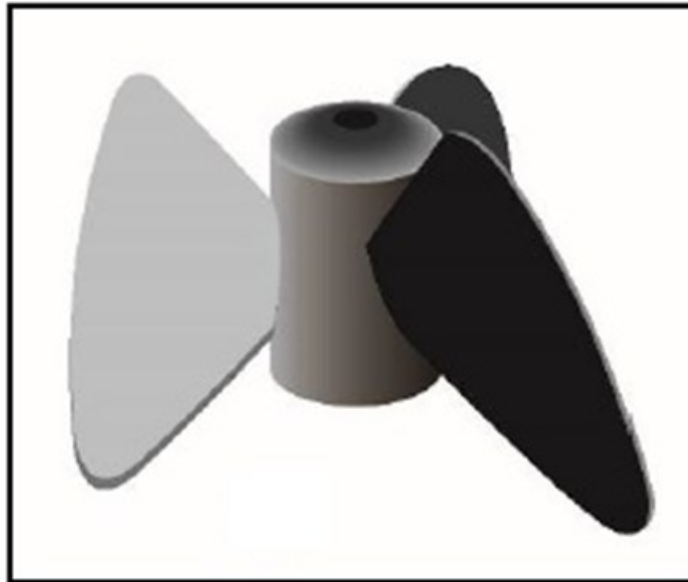


Рисунок 1.12 – Форма імпелера ( Botlagunta, Mahendran et al)

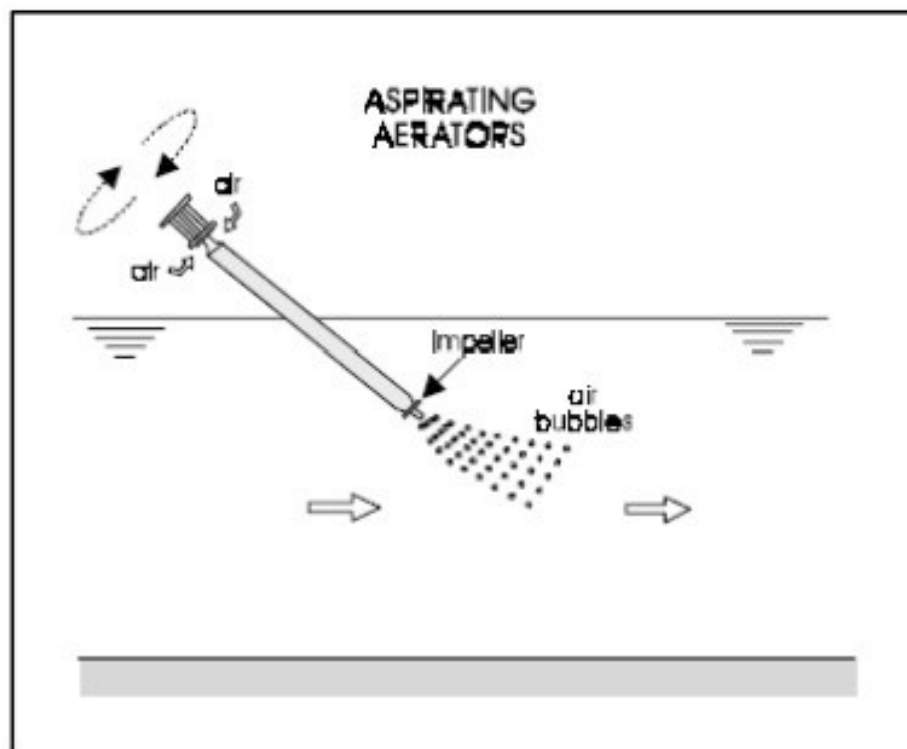


Рисунок 1.13 – Схема подачі повітря від аератора (Prof. Alberto CUOCI  
Company Supervisor: Dr. Thomas HOEHNE Candidate: Tural MAMEDOV)



Рисунок 1.14 – Фото пристрою для створення струменів повітря в аеротенку

<https://www.indiantextilemagazine.in/korting-caustic-recovery-plants-reduce-waste-water-load/>

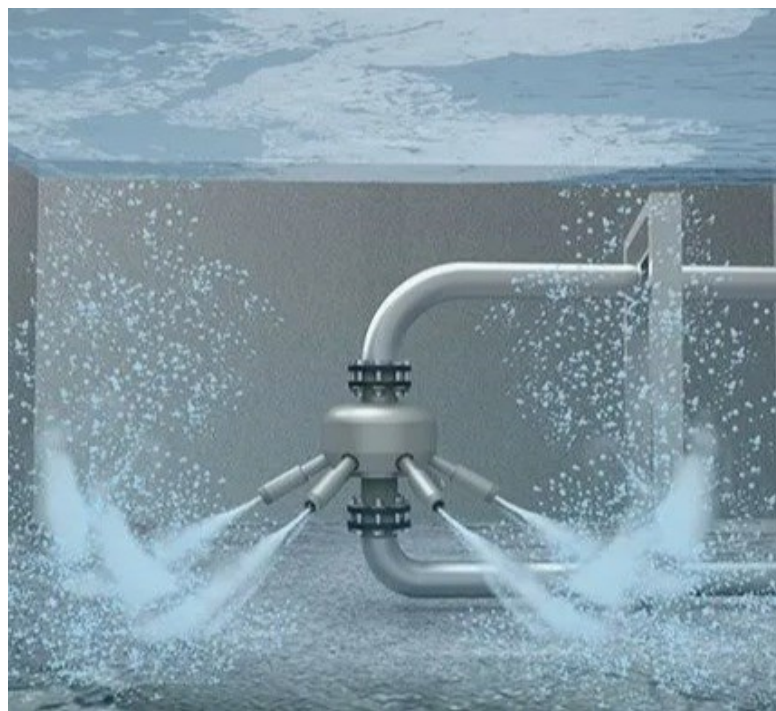


Рисунок 1.15 – Подача струменів повітря в аеротенк

<https://www.indiantextilemagazine.in/korting-caustic-recovery-plants-reduce-waste-water-load/>

Для подачі повітря в аеротенк на станціях аерації використовують спеціалізовані повітрорудувки різної потужності (рис. 1.16, рис. 1.17).



Рисунок 1.16 – Спеціалізована повітрорудувка для подачі повітря в аеротенк

[https://ru.made-in-china.com/co\\_chinambbr/product\\_Solar-Energy-Environmental-Protection-Low-Energy-Consumption-Roots-Blower\\_uonhruungu.html](https://ru.made-in-china.com/co_chinambbr/product_Solar-Energy-Environmental-Protection-Low-Energy-Consumption-Roots-Blower_uonhruungu.html)



Рисунок 1.17 – Спеціалізована повітрорудувка для подачі повітря в аеротенк

<https://www.roboschi.com/en/knowledge-base/discover-learn/multistage-centrifugal-blowers-catalog/>

Слід зазначити, що найбільш енерговитратним процесом при роботі аеротенку є саме процес подачі повітря в очисну споруду. Тому вкрай важливо мати методики для наукового обґрунтування геометрії розташування систем подачі повітря в аеротенк.

## **1.2 Аналіз наукових публікації по проблемі біологічного очищення стічних вод**

Проблемі біологічного очищення стічних вод (рис. 1.18) приділяється значна увага в світі [1, 35, 41, 102, 103, 106, 109, 122, 124].



Рисунок 1.18 – Аерація в системі біологічного очищення стічних вод (Disc aerator (wateronline.com), Prof. Alberto CUOCI Company Supervisor: Dr. Thomas HOEHNE Candidate: Tural MAMEDOV)

В Україні фундаментальні розробки в даному науковому напрямі зроблені в Київському національному університеті будівництва і архітектури (КНУБА), Харківському національному університеті міського господарства імені О. М. Бекетова, Національному університеті водного господарства та природокористування, зокрема, в роботах акад. Олійника О. Я., Айрапетян Т. С., Карагяура А. С. В наукових публікаціях, що присвячені даній

актуальній проблемі, розглядаються питання лабораторних, промислових експериментів по оцінці ефективності біологічного очищення стічних вод, експериментального визначення коефіцієнтів масопереносу в очисних спорудах, створення математичних моделей різного рівня та їх практичного застосування як для «класичних» споруд біологічного очищення, так і споруд з рухомим біоценозом.

Так, наукові дослідження в роботі [50] присвячені визначенню профілю концентрації розчиненого кисню по глибині біоплівки. Дослідження здійснені як експериментально, за допомогою прецизійних мікроелектродів, так і теоретично, шляхом використання методу математичного моделювання. Математичне моделювання базується на використанні одновимірної моделі біоплівки. До цієї моделі додаються рівняння реактора ідеального змішування з метою врахування умов в об'ємі рідини з процесами на межі розділу фаз. В роботі здійснено дослідження по впливу гідродинамічних умов і швидкості потоку на товщину прикордонного дифузійного шару. Додатково досліджені процеси споживання кисню бактеріями-нітрифікаторами. При проведенні досліджень здійснюється оцінка параметра ерозії, який визначає підсумкову щільність і товщину біомаси. Автори показують, що кінетика нітрифікації при дефіциті кисню наближається до першого порядку. Результати експериментальних досліджень показали високу кореляцію з розробленою математичною моделлю. Автори роботи визначали емпіричну залежність між швидкістю потоку та параметром ерозії. В цілому, можна стверджувати, що в роботі розроблено інструмент для проєктування систем очищення стічних вод. Як недолік, слід відзначити, що теоретичні дослідження базуються лише на використанні одновимірної моделі. Відомо, що одновимірні моделі не враховує просторову структуру біоплівки з її порами та каналами. Також в роботі застосована «спрощена» кінетика, що не враховує вплив температурних коливань на коефіцієнти дифузії, а оцінка параметра ерозії має переважно емпіричний характер. В роботі [51] здійснено аналіз математичних моделей біологічного очищення стічних вод з урахуванням кінетики швидкості росту

біомаси. Автор роботи досліджує різні конфігурації реакторів, а саме - каскадні системи з рециркуляцією та мембранні біореактори. Для побудови математичної моделі використовуються нелінійні диференціальні рівняння. В роботі здійснюється аналіз спрощених односубстратних моделей. Такий підхід не дає можливості враховувати склад реальних стічних вод.

В роботі [52] наведені результати дослідження нітрифікуючого біоплівкового реактора з нерухомим шаром. Дана робота спрямована на рішення дослідження «класичних задач» в проблемі біологічного очищення стічних вод. Особливу увагу має факт, що експериментальне дослідження тривало 1750 днів. Це показує, що проведення фізичного експерименту в області біологічного очищення стічних вод потребує значного часу, що не дає можливості використовувати фізичний експеримент як «щоденний» інструмент для рішення прикладних задач. В роботі наводиться опис стратегії промивання реактора. Слід зазначити, що в даній роботі математична модель є одновимірною. Таким чином, на базі такої моделі неможливо врахувати складну архітектуру біоплівки, реальний розподіл потоків у реактора та, що особо важливо - гідродинаміку в очисній споруді.

Робота [54] присвячена рішення задачі по видаленню азоту зі стічних вод за допомогою анаеробного окиснення амонію. Наукові дослідження проведені в лабораторних умовах. В роботі наведені результати порівняння двох кінетичних моделей. Слід зазначити, що дослідження обмежене використанням синтетичних стічних вод, що не враховує вплив реальних домішок, таких як органічні речовини, важкі метали або коливання солоності на процес очищення. Отримані дані можуть призвести до некоректного результату при переході від лабораторного масштабу до промислових реакторів великого об'єму.

У роботі [62] досліджується процес змішування в мембранних біореакторах. Дослідження проведені за допомогою методів CFD моделювання та експерименту. Дослідження проведені для випадку перемішування стічних вод як механічними мішалками, так і системами

аерації. Відзначається, що вкрай «небезпечним» для ефективної роботи біореактору є утворенню застійних зон, а також накопичення осаду на мембранах. Слід підкреслити, що в роботі здійснена розробка CFD-моделі. Ця модель дає можливість враховувати взаємодію між рідиною, твердими частинками активного мулу та повітряними бульбашками. В роботі показано, що використання CFD-моделювання, як інструмента досліджень, дає можливість вирішувати складні задачі по оптимізації конструкції очисних споруд. В роботі показано, що визначення гідродинаміки в спорудах є особливо важливим для покращення ефективності очищення стічних від. Слід підкреслити, що певним «недоліком» CFD-моделі є значні обчислювальні ресурси. При такій ситуації виникають проблеми практичного використання CFD-моделі для проведення «серійних» розрахунків в проєктних установах.

Робота [63] присвячена застосуванню CFD-моделювання для вдосконалення конструкції змішувальних резервуарів для очищення стічних вод. Дана робота показує певний «перехід» від застосування емпіричних моделей (що широко використовуються на практиці) до найбільш сучасного методу математичного моделювання - CFD моделювання гідродинамічних потоків. Показано, що такий підхід створює нову стратегію щодо вирішення задач оптимізації – це визначення входів, перегородок та мішалок для запобігання короткого замикання потоків та утворення застійних зон. Особлива увага присвячена рішенню гідродинамічної задачі. Показано, що зміни в геометрії біологічного реактору можуть призвести до значного покращення якості змішування та зменшення об'єму мертвих зон. Застосовані CFD-моделі базуються на однофазному наближенні. Такий підхід не враховує складну взаємодію між рідиною та бульбашками повітря.

Робота [64] присвячена сучасному стану впровадження математичних моделей класу ASM (це моделі ASM1, ASM2d, ASM3). Відомо, що саме ці моделі широко використовуються для проєктування, реконструкції та оптимізації роботи споруд біологічної очистки стічних вод. В роботі здійснено аналіз переваг інтеграції біохімічних моделей з гідродинамічними моделями.

Дослідження показали, що використання моделей класу ASM дозволяє значно скоротити терміни проєктування, що є особливо важливим для вартості проєкту. Це їх суттєва перевага. Але моделі даного класу залишаються лише наближеною ідеалізацією процесу біологічного очищення стічних вод. Моделі не враховують гідродинаміки в спорудах біологічного очищення.

В роботі [66] розглядається процес формування біоплівки на пластикових носіях у системах MBBR. Особливістю роботи є проведення фізичних експериментів із використанням різних типів завантаження. Важливим результатом є визначенню взаємозв'язку між швидкістю росту бактерій та швидкістю їхнього вимивання. Така інформація важлива для проєктування MBBR.

У роботі [68] розглядається використання комплексної моделі, що поєднує CFD модель та модифіковану модель активного мулу №3 (ASM3). Такий підхід використано для моделювання роботи реактору біологічного очищення стічних вод. Математичне моделювання базується на використанні 3D CFD моделі. Додатково враховується кінетика споживання біогенів (азоту та фосфору). Показано вплив конфігурації реактора на розподіл біомаси та розчиненого кисню. Таким чином показано, що для аналізу кисневого режиму в спорудах біологічного очищення стічних вод важливо використання саме CFD моделювання, так як за допомогою тільки такого підходу є можливість визначення впливу «геометрії» реактору та гідродинаміки на процеси всередині очисної споруди.

В роботі [76] наведені результати огляду концепції оптимізації та контролю аерації в спорудах біологічного очищення стічних вод. Показано, що аерація є найбільш енергомістким процесом при обробці стічних вод. Витрати енергії досягають до 75% від загальних витрат. В роботі розглянуто вплив аераційного обладнання (повітрорудки, дифузори) на загальну ефективність переносу кисню. Результати досліджень свідчать про те, що впровадження комбінованих стратегій управління дозволяє скоротити енергоспоживання на 10-25%.

У роботі [98] розглядається розробка та практичне тестування моделі «plant-wide». Ця модель дає можливість описувати динаміку аерації в межах усієї станції очищення стічних вод, що є дуже важливим з практичної точки зору. Автори використовують результати експериментів на реальних об'єктах. В роботі показано, що для практики дуже важливим є наявність теоретичного інструменту для оптимізації стратегій аерації. При наявності такого теоретичного інструменту є можливість заздалегідь знизити експлуатаційні витрати. Слід підкреслити, що математична модель, що запропоновано в роботі, є досить складною і потребує великої кількості вхідних параметрів.

Робота [94] присвячена побудові однофазних та багатофазних моделей. Моделі базуються на використанні CFD моделюванні. Досліджується процес динаміки біоплівки у реакторах із нерухомим шаром. Автори підкреслюють, що методи CFD-моделювання є найбільш потужним інструментом для аналізу динамічних процесів в спорудах біологічного очищення стічних вод. Однак слід враховувати, що комерційні CFD-комп'ютерні програми потребують величезних обчислювальних ресурсів. Це є суттєвою перешкодою на шляху їх використання в проєктній практиці.

У роботі [118] розглядається проблема підвищення ефективності очищення стічних вод у реакторах SBR. Для цього використовуються носії біоплівки. Дослідження проводилися методом фізичного моделювання в лабораторних умовах. При проведенні досліджень використовувалися різні режими аерації. Однак проведені дослідження мають такий недолік, як короткий термін спостереження.

В статті [111] представлено ефективну математичну модель для прогнозування видалення субстрату та росту мікроорганізмів при використанні систем із прикріпленою біомасою. Процес моделювання здійснюється за допомогою балансової моделі та використанні середовища Simulink. Показано, що використання балансової моделі дозволяє оцінювати ефективність роботи очисної споруди без проведення дороговартісних натурних експериментів. Такий підхід є важливим на етапі проєктування

«фор-ескіз». Але використання балансової моделі не дає можливості оцінювати вплив гідродинаміки та геометрії очисної споруди на процес масопереносу. Як відомо, балансова модель має таке припущення - повне перемішування в споруді та рівномірний розподіл біоплівки на всіх носіях. Такий підхід не завжди задовольняє вимогам замовників проєкту. Також модель даного класу не дає можливості визначати застійних зони в реакторі.

В статті [115] розглядається побудова математичної моделі роботи споруди біологічного очищення стічних вод шляхом поєднання таких базових факторів, як: гідродинаміка (CFD моделювання), динаміка пластівців (PBM – Population Balance Modelling), мікроскопічна біохімічна кінетика. Розглядається моделювання процесу очищення стічних вод в споруді з перегородкою та системою аерації. Основою математичної моделі є блок CFD моделювання, що дає можливість визначати поле швидкості потоку в реакторі. Побудована математична модель дає можливість оптимізувати конструкцію аеротенків. Особливо важливо, що при розрахунках враховується вплив фізико-хімічних властивостей біологічної суспензії на процес очищення. Слід зазначити, що суттєвим недоліком розробленої математичної моделі є значна обчислювальної складність. Тобто, для використання моделі потрібен суперкомп'ютер. Іншим недоліком розробленої моделі є використання значної кількості емпіричних параметрів для «замикання» процесів, що враховуються при розрахунку. Відомо, що визначення таких параметрів потребує тривалого часу на проведення експериментів.

В роботі [75] досліджується вплив конфігурації аерації на гідродинамічну структуру потоків всередині очисної споруди. Здійснюється аналіз впливу режимів подачі повітря на формування полів швидкостей в спорудах біологічного очищення стічних вод. В якості інструмента дослідження використовується метод CFD-моделювання. Чисельне моделювання проведено для різних схем розташування дифузorzів. Проведені дослідження показали, що правильна геометрія аераційної системи є ключовим фактором у

забезпеченні ефективності работ споруд біологічного очищення стічних вод та стабільності біологічних процесів.

Аналіз наукових публікацій присвячений проблемі дослідження багатофакторних процесів в спорудах біологічного очищення стічних вод показав, що використання експериментальних досліджень [50, 97, 106] дає можливість визначити важливі закономірності процесів масопередачі, формування біоплівки тощо, але існує такий великий їх недолік, як тривалість експерименту (15-20 діб та більше). Крім цього, проведення експериментальних досліджень потребує коштовного обладнання (рис. 1.19).

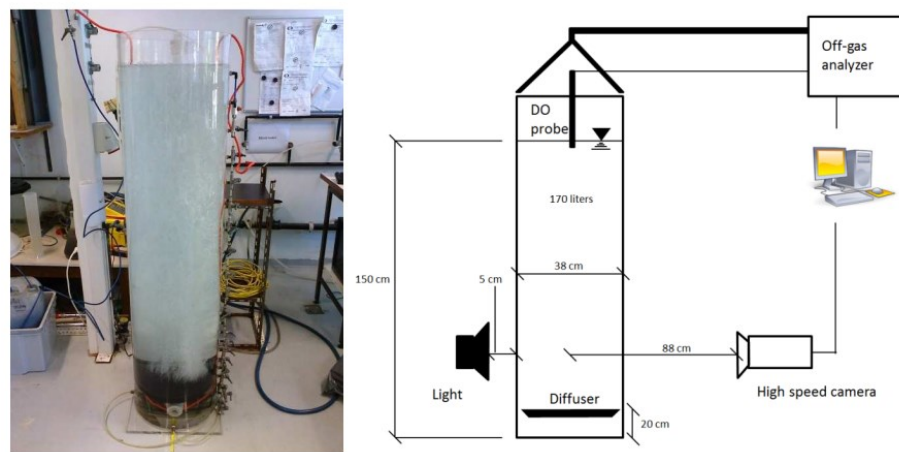


Рисунок 1.19 –Експериментальне обладнання по дослідженню повітряного режиму в аеротенку (Giacomo Bellandi)

Тому, експериментальні методи дослідження не можуть бути щоденним інструментом, що використовується при проведенні проєктних робіт.

Альтернативним підходом є використання метода математичного моделювання [57, 59-61, 63, 64, 66, 69, 70, 75-77, 79, 81, 83–86, 92, 95, 96, 99, 100, 105, 109–111, 116, 117, 1120, 124]. Аналіз літературних джерел показав, що для теоретичних досліджень найбільшого поширення набули емпіричні моделі та нуль-вимірні моделі. Емпіричні моделі є основним інструментом при проєктуванні споруд біологічної очистки стічних вод. Ці моделі дають можливість швидко визначити параметри аеротенка, так як використовують

розрахункові залежності, що мають вигляд простих алгебраїчних формул. Але моделі не враховують гідродинаміку в очисній споруді та можуть бути використані для типових конфігурацій аеротенків.. Це є їх суттєвим недоліком. Нуль-вимірні моделі дають можливість визначати динаміку (зміну за часом) шуканих параметрів аеротенку, але також не враховують гідродинаміку в очисній споруді. Розрахунок ведеться лише на базі балансових співвідношень масопередачі. Крім цього, суттєвим недоліком моделей цієї групи є те, що концентрація шуканих параметрів (наприклад, концентрація активного мулу тощо) визначається на виході зі споруди, а в середині споруди вона приймається рівною концентрації на виході. Тобто, всередині очисної споруди концентрація шуканих параметрів не визначається. В деяких випадках для аналізу процесів масопереносу в аеротенках використовують одновимірні моделі. Такі моделі дають можливість визначити зміну параметрів всередині споруди вздовж її корпусу. Але ці моделі також не спроможні детально аналізувати структуру течії всередині очисної споруди та визначати вплив конфігурації аеротенку на розподіл концентрації активного мулу, субстрату, розчиненого кисню в споруді та вплив геометрії розташування аераторів на поле концентрації розчиненого кисню. Тому перераховані математичні моделі не можуть бути використані для детального вивчення процесів масопереносу в аеротенках.

Як свідчать дані літературних джерел, найбільш потужним інструментом теоретичного дослідження процесів в спорудах біологічного очищення стічних вод є CFD моделювання [51-53, 62, 65, 67, 68, 73, 74, 85–88, 90, 91, 93, 94, 101–103, 104, 108, 113 – 115, 121 - 123 ] (рис. 1.20, рис.1.21).

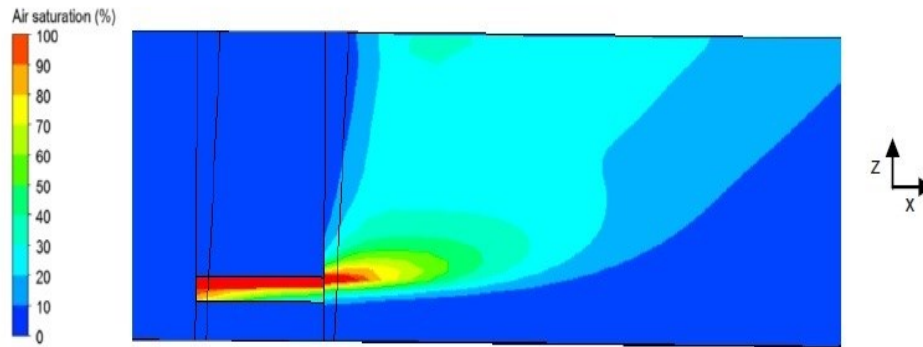


Рисунок 1.20 – CFD моделювання, концентрація повітря (Maguire jet aerator, Tom Matko)

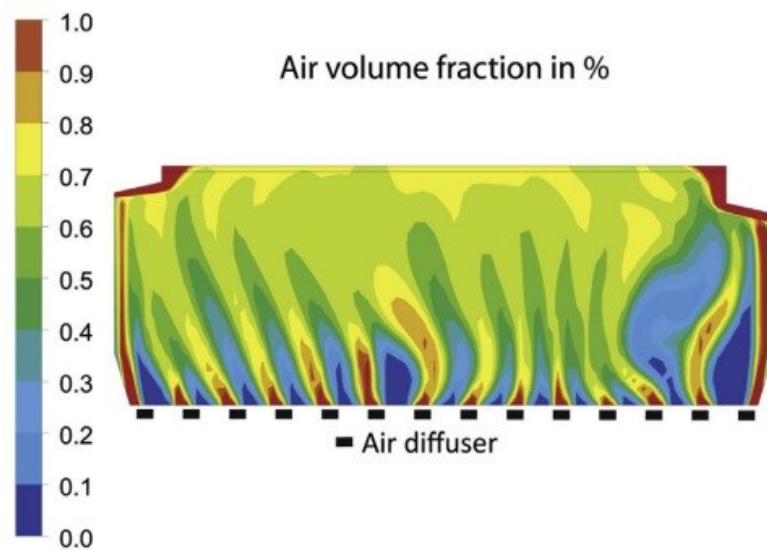


Рисунок 1.21 – CFD моделювання, концентрація повітря в аеротенку (A. M. Karpinska, John Bridgeman)

Даний метод дає можливість визначати деталі процесу очищення в будь-якій точці аеротенку, визначати вплив різних параметрів на зміну ефективності очищення стічних вод. Але більшість складних 2D та 3D моделей залишаються занадто громіздкими для широкого впровадження в повсякденну інженерну практику через високі вимоги до обчислювальних ресурсів та специфічних вхідних даних. Особливо слід зазначити, що існує проблема математичного моделювання турбулентності при моделюванні гідродинаміки в очисній споруді. Комерційні коди, що розроблені для рішення задачі гідродинаміки, базуються на чисельному інтегруванні рівнянь Нав'є-

Стокса. Практична реалізація даної моделі потребує використання дуже дрібної розрахункової сітки. Це потрібно для того, щоб схемна в'язкість не переважала фізичну в'язкість. При практичній реалізації даних кодів використовуються різні моделі турбулентності. Так, використання моделей турбулентності типу DNS, LES, потребує особливо потужних комп'ютерів. Такі потужні комп'ютери практично відсутні в багатьох проєктних організаціях. Проблемою є також необхідність використання значної кількості емпіричних параметрів для «замикання» рівнянь моделей, в тому числі моделей турбулентності. Це створює певну проблему на етапі використання CFD моделей при проєктуванні конкретних очисних споруд.

Таким чином, аналіз літературних джерел показав, що існує проблема забезпечення проєктувальників теоретичним інструментом рішення багатофакторних задач, що виникають при проєктуванні аеротенків, що, з одного боку, є потужним, як багатофакторні CFD моделі, тобто дають можливість розраховувати гідродинаміку та враховувати конфігурацію споруди, а з іншого боку – не потребують потужних комп'ютерів для практичної реалізації (тобто, можливість проведення серійних розрахунків протягом робочого дня).

## Висновки до Розділу 1

1. Аналіз літературних джерел показав, що проведення лабораторних та експериментальних досліджень для аналізу різних процесів, що мають місце в спорудах біологічного очищення стічних вод, потребує значного часу, коштовного обладнання, кваліфікованих фахівців для обробки результатів вимірювань.
2. Правильна геометрія аераційної системи є ключовим фактором у забезпеченні гідравлічної ефективності та стабільності біологічних процесів.
3. Робота аераторів є найбільш енерговитратним процесом при біологічному очищенні стічних вод; тому розробка методів, що дозволяють

обґрунтувати раціональне розташування аераторів є особливо важливою задачею.

4. Аналіз літературних джерел свідчить про те, що зараз з'явилася увага до рішення специфічних інженерних задач при роботі аераторів, задач, які мають «екологічний» напрям, а саме – аналіз потрапляння в середовище аеротенку речовин, що є «несприятливими» для нього.

5. Вкрай важливим аспектом в області біологічного очищення стічних вод є врахування гідродинаміки в очисних спорудах; тому використання камерних (нуль-вимірних) моделей, одновимірних моделей для розрахунку споруд біологічного очищення стічних вод не є ефективним.

6. Важливим аспектом є розробка математичних моделей, що враховують конфігурацію очисних споруд.

7. Використання комерційних CFD моделей потребує значних ресурсів обчислювальної техніки та значної кількості вхідних параметрів, що не є зручним для щоденного використання таких моделей на практиці; використання таких моделей потребує значного часу, що є вкрай незручним для проєктувальників.

8. Важливим залишається питання енергетичної оптимізації систем аерації (в першу чергу – обґрунтування розташування аераторів в очисній споруді), що складають основну частку експлуатаційних витрат.

## РОЗДІЛ 2 МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ БІОЛОГІЧНОЇ ОЧИСТКИ ВОДИ З УРАХУВАННЯМ ПЕРЕНОСУ РОЗЧИНЕНОГО КИСНЮ

В даному розділі розглянуті багатофакторні математичні моделі, що використовуються в роботі для теоретичного аналізу роботи аеротенку з урахуванням процесу переносу розчиненого кисню в реакторі.

### 2.1 2D модель очищення води в аеротенку з урахуванням переносу розчиненого кисню

Моделювання процесу біологічного очищення стічних вод в аеротенку (рис. 2.1) здійснюється з урахування таких процесів:

- зміни концентрації  $S(t, x, y)$  субстрату в очисній споруді ( $t$  – час);
- зміни концентрації  $X(t, x, y)$  активного мулу в очисній споруді;
- зміни концентрації  $DO(t, x, y)$  розчиненого кисню в очисній споруді;
- інтрузії активного мулу в аеротенк (інтенсивність інтрузії задається користувачем моделі);
- інтрузії субстрату в аеротенк;
- інтрузії повітряних бульбашок в аеротенк та зміни їх концентрації в споруді;
- інтрузії повітряних бульбашок в споруду.

Місце інтрузії активного мулу, повітря, субстрату задається користувачем моделі.



Рисунок 2.1 – Аеротенк + відстійник на станції аерації

(<https://www.netsolwater.com/analyzing-the-process-of-completely-mixed-reactor-with-sludge-recycle.php?blog=2276>)

З урахування перелічених процесів 2D математична модель очищення стічних вод в аеротенку (рис. 2.2), профільна задача, має вигляд [1, 3, 79, 105]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial uS}{\partial x} + \frac{\partial vS}{\partial y} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial S}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial S}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial X}{\partial t} + \frac{\partial uX}{\partial x} + \frac{\partial vX}{\partial y} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial X}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial X}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial DO}{\partial t} + \frac{\partial uDO}{\partial x} + \frac{\partial vDO}{\partial y} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial DO}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial DO}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial O}{\partial t} + \frac{\partial uO}{\partial x} + \frac{\partial (v+w)O}{\partial y} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial DO}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial DO}{\partial y} \right) + \\ + \sum Q_i(t) \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\frac{dDO}{dt} = K_L a (DO_{\max} - DO) - r; \quad (2.5)$$

$$\frac{dO}{dt} = -K_L a (DO_{\max} - DO); \quad (2.6)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\mu}{Y} X \quad (2.7)$$

$$\frac{dX}{dt} = \mu X - K_d X \quad (2.8)$$

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{S}{S + K_s} \cdot \frac{DO}{k_{DO} + DO}, \quad (2.9)$$

де:  $K_d$  – коефіцієнт, що враховує швидкість вимирання активного мулу;

$t$  – час;

$X(x, y, t)$  – концентрація активного мулу;

$S(x, y, t)$  – концентрація субстрату;

$O(x, y, t)$  – концентрація повітряних бульбашок у воді реактору;

$DO(x, y, t)$  – концентрація розчиненого кисню в воді реактору ;

$r$  – швидкість споживання розчиненого кисню активним мулом;

$\mu_{x,y}(t)$  – емпіричний параметр;

$\mu_{\max}$  – емпіричний параметр;

$Y$  – емпіричний параметр;

$u(x, y), v(x, y)$  – компоненти швидкості потоку;

$w$  – швидкість вертикального руху повітря вгору від дифузору;

$\mu_x(x, y), \mu_y(x, y)$  – коефіцієнти дифузії;

$a$  – питома поверхня контакту фаз «повітря-вода»;

$Q_i(t)$  – інтенсивність подачі повітря в споруду для аерації;

$x_i, y_i$  – місце розташування аератора;

$DO_{\max}$  – максимальне значення концентрації кисню у стічних водах;

$K_S$  – емпіричний параметр;

$K_L$  – емпіричний параметр;

$\mu_{\max}$  – емпіричний параметр;

$k_{DO}$  – емпіричний параметр;

$Y$  – параметр.

Приймається, що параметр  $a$  дорівнює площі поверхні бульбашки, тобто:

$$a = 4\pi R^2.$$

Слід зазначити, що існує залежність [26]:

$$K_{La} = K_L \cdot a,$$

де  $K_{La}$  – об'ємний коефіцієнт масопередачі (визначається експериментальним шляхом).

Відносно наведеної системи моделюючих рівнянь слід зазначити наступне: для прогнозування кисневого режиму в аеротенку потрібно

здійснити рішення рівнянь (2.1)-(2.4), так як значення концентрації активного мулу, субстрату, повітря, розчиненого кисню в кожній точці простору аеротенку різні та впливають на значення концентрації розчиненого кисню. Значення параметру  $\mu_{x,y}(t)$  залежить від розчиненого кисню, а саме, цей параметр впливає на інтенсивність зміни концентрації субстрату та активного мулу згідно рівнянням Monod. Таким чином, мова йде про рішення системи нелінійних рівнянь масопереносу (2.1)-(2.4). Це суттєво ускладнює рішення задачі про прогнозування кисневого режиму в спорудах біологічної очистки стічних вод.

Потрібно сказати, що кожне рівняння переносу з даної системи виражає фундаментальний закон механіки суцільного середовища – закон збереження маси в рухомому середовищі.

Схема конструкції аеротенку показана на рис. 2.2

Відзначимо, що рівняння (2.1)-(2.5), з точки зору рівнянь математичної фізики, – це рівняння конвективно-дифузійного переносу домішки (рівняння переносу). Тому постановка крайових умов для цих рівнянь практично однакова. Розглянемо постановку крайових умов для деякої функції  $C$  (ця функція є загальним представленням функцій  $X, S, DO, O$ ).

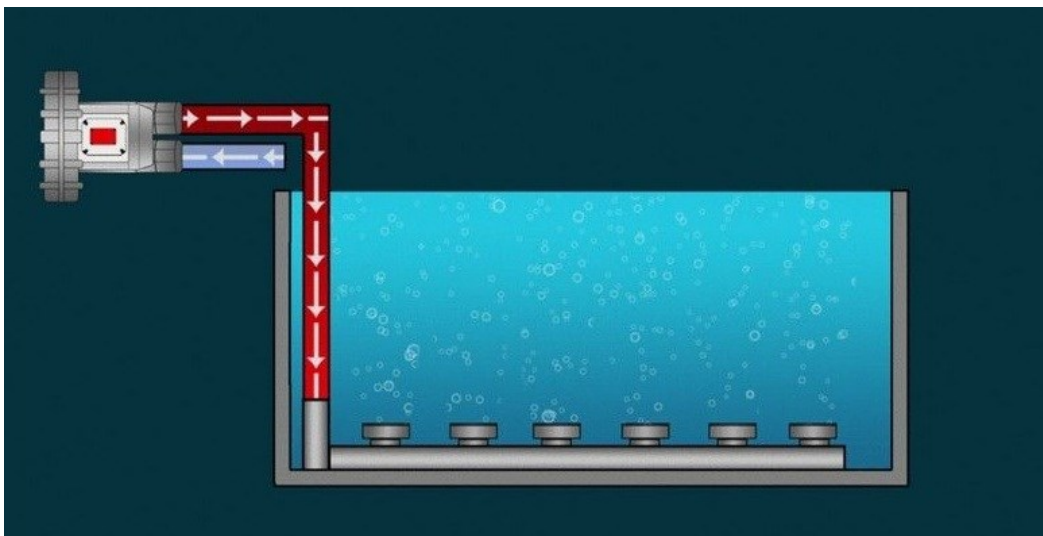


Рисунок 2.2 Схема аерації в аеротенку

(<https://www.nchasia.com/en-my/solution/biological-wastewater-treatment/>)

Крайові умови мають вигляд:

1. Границя, де потік «входить» в споруду:  $C = C_{in}$ . де  $C_{in}$  – відома концентрація  $(X, S, DO)$ .

2. На границі, де потік «виходить» з області, ставиться умова:  $\left. \frac{\partial C}{\partial n} \right| = 0$ ,

де  $C$  – концентрація  $(X, S, DO, O)$ ,  $n$  – одиничний вектор нормалі до вихідної границі.

3. На твердих поверхнях  $\left. \frac{\partial C}{\partial n} \right| = 0$ ,  $n$  – де одиничний вектор нормалі до поверхні,  $C$  – концентрація  $(X, S, DO, O)$ .

Для моменту часу  $t=0$  ставиться умова  $C = C_0$  в розрахунковій області, де  $C_0$  – відома концентрація  $(X, S, DO, O)$ .

Приймається, що формування концентрації розчиненого кисню в воді має місце за рахунок потрапляння кисню з бульбашок повітря, що рухаються всередині споруди. Динаміка концентрації розчиненого кисню описується моделлю (2.5). Також приймемо, що відомими є:

- 1) кількість бульбашок повітря, що виходять в одиницю часу з аератору;
- 2) площа поверхні кожної бульбашки повітря;
- 3) об'єм кожної бульбашки повітря.

Для експрес розрахунку приймається, що усі бульбашки повітря, що виходять з аератору, мають один і той же розмір. Концентрація кисню в кожній бульбашці повітря приймається 21 % від маси повітря.

Відзначимо, що для функції « $O$ », тобто концентрації повітряних бульбашок в стічній воді, що потрапляє в аеротенк, ставиться гранична умова рівності нулю цієї концентрації, тобто  $O_{in}=0$ . Тобто, приймається, що повітряні бульбашки потрапляють в аеротенк внаслідок роботи тільки пристрою, що розташований всередині аеротенку (рис. 2.2).

Також можна використовувати інший підхід щодо моделювання поширення повітря в аеротенку від дифузору – це задавати інтенсивність «емісії» повітря [в г/с] від дифузору. Для випадку, коли є струмінь повітря,

що має швидкість  $V$ , що рухається крізь отвір, що має площу  $S$ . Можна задавати концентрацію повітря в цьому струмені.

Для застосування приведених моделюючих рівнянь потрібно знати поле швидкості потоку всередині аеротенку. Для цього потрібно вирішити задачу гідродинаміки. Рішення цієї задачі буде розглянуто далі.

## 2.2 3D математична модель очищення води в аеротенку

3D моделюючі рівняння процесу біологічного очищення води в аеротенку мають вигляд [1, 3, 79, 105]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial uS}{\partial x} + \frac{\partial vS}{\partial y} + \frac{\partial wS}{\partial z} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial S}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial S}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_z \frac{\partial S}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial X}{\partial t} + \frac{\partial uX}{\partial x} + \frac{\partial vX}{\partial y} + \frac{\partial wX}{\partial z} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial X}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial X}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_z \frac{\partial X}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial DO}{\partial t} + \frac{\partial uDO}{\partial x} + \frac{\partial vDO}{\partial y} + \frac{\partial wDO}{\partial z} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial DO}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial DO}{\partial y} \right) + \\ & \quad + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_z \frac{\partial DO}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial O}{\partial t} + \frac{\partial uO}{\partial x} + \frac{\partial vO}{\partial y} + \frac{\partial wO}{\partial z} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial DO}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial O}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_z \frac{\partial O}{\partial z} \right) + \\ & + \sum Q_i(t) \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \delta(z - z_i) \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\frac{dDO}{dt} = K_L a (DO_{\max} - DO) - r; \quad (2.14)$$

$$\frac{dO}{dt} = -K_L a (DO_{\max} - DO); \quad (2.15)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\mu}{Y} X \quad (2.16)$$

$$\frac{dX}{dt} = \mu X - K_d X \quad (2.17)$$

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{S}{S + K_s} \cdot \frac{DO}{k_{DO} + DO}, \quad (2.18)$$

де:

$K_d$  – коефіцієнт, що враховує швидкість вимирання активного мулу;

$t$  – час;

$X(x, y, z, t)$  – концентрація активного мулу ;

$S(x, y, z, t)$  – концентрація субстрату ;

$O(x, y, z, t)$  – концентрація повітряних бульбашок у воді реактору;

$DO(x, y, z, t)$  – концентрація розчиненого кисню в воді реактору ;

$r$  – швидкість споживання розчиненого кисню активним мулом (розраховується за моделлю Г. Еката);

$\mu_{x,y,z}(t)$  – емпіричний параметр;

$\mu_{\max}$  – емпіричний параметр;

$Y$  – емпіричний параметр;

$u(x, y, z), v(x, y, z), w(x, y, z)$  – компоненти швидкості потоку;

$w$  – швидкість руху повітря вгору;

$\mu_x(x, y, z), \mu_y(x, y, z), \mu_z(x, y, z)$  – коефіцієнти дифузії;

$a$  – питома поверхня контакту фаз «повітря-вода»;

$Q_i(t)$  – інтенсивність подачі повітря в споруду для аерації;

$x_i, y_i, z_i$  – місце розташування аератора;

$DO_{\max}$  – максимальне значення концентрації кисню у стічних водах;

$K_S$  – емпіричний параметр;

$K_{La}$  – емпіричний параметр;

$\mu_{\max}$  – емпіричний параметр;

$k_{DO}$  – емпіричний параметр;

$Y$  – параметр.

Розглянемо постановку крайових умов для деякої «узагальненої» функції  $C$  (вона представляє функції  $X, S, DO, O$  – відповідні концентрації). Крайовими умовами є наступні:

1. На границі, де потік «входить» в споруду:  $C = C_{in}$ . де  $C_{in}$  – відома концентрація ( $X, S, DO$ ).

2. На границі, де потік «виходить» з області, ставиться умова:  $\left. \frac{\partial C}{\partial n} \right| = 0$ .

де  $C$  – концентрація ( $X, S, DO, O$ ) одиничний вектор нормалі до вихідної границі.

3. На твердих поверхнях  $\left. \frac{\partial C}{\partial n} \right| = 0$ ,  $n$  – одиничний вектор нормалі до твердої поверхні,  $C$  – концентрація ( $X, S, DO, O$ ).

Для моменту часу  $t=0$  ставиться умова  $C = C_0$  в розрахунковій області, де  $C_0$  – відома концентрація ( $X, S, DO, O$ ).

Як було сказано вище, для параметра « $O$ » – концентрація повітряних бульбашок в стічній воді, що потрапляє в аеротенк, ставиться гранична умова рівності нулю цієї концентрації. Тобто, приймається, що повітряні бульбашки потрапляють в аеротенк внаслідок роботи пристрою, що розташований всередині аеротенку (аератор). Також можна використовувати інший підхід щодо моделювання поширення повітря в аеротенку від дифузору – це задавати інтенсивність «емісії» повітря [в г/с] від дифузору. Для випадку, коли є струмінь повітря, що має швидкість  $V$ , що рухається крізь отвір, що має площу  $S$ , – задавати концентрацію повітря в цьому струмені.

Для застосування приведених моделюючих рівнянь потрібно знати тривимірне поле швидкості потоку всередині аеротенку. Для цього потрібно вирішити задачу гідродинаміки. Рішення цієї задачі буде розглянуто далі.

### 2.3 Модель гідродинаміки

Задача гідродинаміки вирішується для визначення поля швидкості потоку стічних вод в аеротенку. Саме це поле «забезпечує» основний рух активного мулу, субстрату, розчиненого кисню та повітряних бульбашок всередині біореактора. Для побудови математичної моделі цього процесу використовується модель потенціального руху. Для двовимірної задачі моделююче рівняння гідродинаміки має вигляд [3]:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} = 0, \quad (2.19)$$

де  $P$  – потенціал швидкості.

Компоненти вектора швидкості визначаються так [3]:

$$u = \frac{\partial P}{\partial x}, v = \frac{\partial P}{\partial y} \quad (2.20)$$

Граничні умови :

- тверда поверхня:  $\frac{\partial P}{\partial n} = 0$ ,  $n$  – одиничний вектор зовнішньої нормалі до поверхні;
- вхідна границя:  $\frac{\partial P}{\partial n} = V_n$ ,  $V_n$  – швидкість потоку (рис. 2.3);
- вихідна границя:  $P = P_0 + const.$

Для рішення 3D задачі гідродинаміки використовується наступне рівняння для потенціалу швидкості [3]:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = 0, \quad (2.21)$$

В даному випадку компоненти вектора швидкості потоку визначаються так [3]:

$$u = \frac{\partial P}{\partial x}, v = \frac{\partial P}{\partial y}, w = \frac{\partial P}{\partial z}. \quad (2.22)$$

Граничні умови для 3D рівняння гідродинаміки аналогічні тим, що були для двовимірного рівняння для потенціалу швидкості.

Слід зазначити, що як двовимірне рівняння для потенціалу швидкості, так і тривимірне рівняння допускають лише чисельне рішення для класу задач, що розглядаються.

## 2.4 Моделюючі рівняння в задачі про визначення раціонального міста розташування аератора

Процес аерації стічних вод всередині аеротенку є особливо важливим процесом, що безпосередньо впливає на ефективність очищення стічних вод в біореакторі. Розчинений кисень потрібен мікроорганізмам, що здійснюють очищення стічних вод, при його нестачі процес очищення практично «затухає». Тому, вкрай важливо забезпечити потрібну концентрацію розчиненого кисню в стічних водах, що проходять через аеротенк.

Як вже було сказано раніше, найбільш енергомістким процесом на станціях очистки стічних вод, складаючи до 75% від загальних витрат електроенергії, є процес аерації. Тому, організація раціонального розміщення аераторів, їх потужність в аеротенку грає особливо важливу роль.

При організації процесу аерації води в аеротенку використовують ряд «типових» підходів , що до розташування пристроїв , що реалізують подачу повітря в аеротенк (наприклад, див. рис. 2.3)



Рисунок 2.3 – Розташування пристроїв, що реалізують подачу повітря в аеротенк

([http://www.hndchbjd.com/?list\\_12/128.html](http://www.hndchbjd.com/?list_12/128.html))

В даній роботі пропонується новий підхід для експрес розрахунку раціонального місця розташування пристрою для подачі повітря в аеротенк. Цей підхід дозволяє «відійти» від типових схем розташування аераторів всередині біореактора та визначати раціональні місця їх розташування з метою організації аерації з урахуванням конкретних умов для конкретного аератора. Розглянемо математичну модель, що створена для рішення цієї задачі для умовної схеми розрахункової області (рис. 2.4).

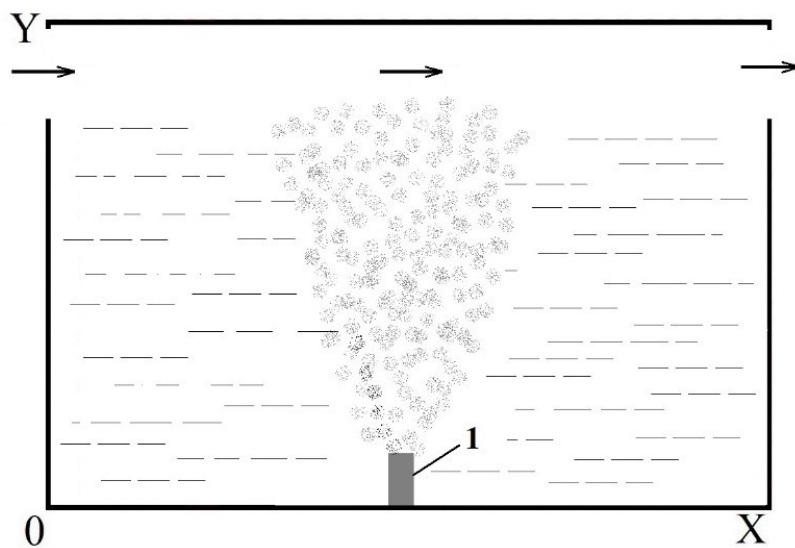


Рисунок 2.4 – Схема розташування аератора: 1 – пристрій для подачі повітря в аеротенк

Математична модель базується на використанні ідеї рішення спряженого рівняння масопереносу кисню в аеротенку згідно теорії Г. Марчука. Розглянемо спряжені рівняння для рівняння масопереносу розчиненого кисню:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C^*}{\partial t} + \frac{\partial uC^*}{\partial x} + \frac{\partial vC^*}{\partial y} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial C^*}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial C^*}{\partial y} \right) + p \end{aligned} \quad (2.23)$$

де  $C^*$  – функція, спряжена з функцією  $DO$  ( $DO$  – концентрація розчиненого кисню в стічних водах, що обробляються в аеротенку),  $p$  – деяка функція, вигляд якої буде наведено нижче.

Граничні умови для спряженого рівняння мають вигляд (Г. Марчук):

$$\mu \frac{\partial C^*}{\partial n} + u_n C^* = 0 \text{ на } \Sigma \text{ при } u_n \geq 0,$$

$$C^* = 0 \text{ на } \Sigma \text{ при } u_n < 0,$$

$$\frac{\partial C^*}{\partial n} = 0 \text{ на твердих поверхнях,}$$

$$C^*(x, y, T) = C^*(x, y, 0).$$

Приймається такий вигляд функції  $p$  (Г. Марчук):

$$p(x, y, t) = \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \delta(t - \tau), \quad (2.24)$$

де  $t$  – час,  $(x_i, y_i)$  – координати точки «інтересу» в області дослідження.

Якщо використовується такий вибір функції  $p$  в спряженому рівнянні, то значення функціоналу

$$I = Q \int_0^T C^*(r_0, t) dt \quad (2.25)$$

буде відповідати значенню концентрації розчиненого кисню в точці  $r_0 = (x_0, y_0)$  (Г. Марчук). Ця точка є точкою «інтересу», тобто точкою, в якій потрібно мати «конкретну» концентрацію розчиненого кисню, що необхідна проєктувальнику.

В спряженому рівнянні використовуються компоненти поля швидкості потоку стічних вод  $u$ ,  $v$ . Таким чином, для рішення спряженого рівняння потрібно знати поле швидкості потоку стічних вод в біореакторі, тобто потрібно вирішити задачу гідродинаміки.

Для рішення задачі гідродинаміки використовуються рівняння Ейлера (ці рівняння записані у формі Громеки-Лемба):

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = -u \frac{\partial \omega}{\partial x} - v \frac{\partial \omega}{\partial y} = -\bar{V} \cdot (\bar{\nabla} \omega), \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega. \quad (2.27)$$

Тут:  $\omega$  – вихор;  $\bar{V}$  – вектор швидкості потоку стічних вод в аеротенку,  $\psi$  – функція течії.

Компоненти вектора швидкості потоку стічних вод визначаються так:

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = u; \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = -v.$$

Крайові умови для рівнянь Ейлера:

- верхня межа:  $\psi = \text{const}$ ;
- тверда поверхня:  $\psi = \text{const}$ ;
- на границі входу: відоме значення швидкості потоку  $u$ , значення функції току  $\psi$  та вихору  $\omega$ :  $\psi|_{\text{вхід}} = \psi(y)$ ,  $\omega|_{\text{вхід}} = 0$ ;
- на межі виходу потоку реалізуються «м'які» граничні умови (P. Roache).

Для моменту часу  $t=0$  має місце умова:  $\omega|_{t=0} = 0$

Таким чином, методологія рішення задачі по визначенню раціонального (оптимального) місця розташування аератора в біологічній споруді така:

1. Здійснюється чисельне рішення рівнянь Ейлера.
2. Розраховується поле швидкості потоку стічних вод в аеротенку.
3. Здійснюється рішення спряженого рівняння.
4. «Будується» поле функціонала (2.25).
5. Знаходиться рішення задачі (координати  $x_0, y_0$  – місця оптимального розташування аератору) виходячи з умови (Г. Марчук)

$$I(x_0, y_0, t) < C_N \quad (2.28)$$

де  $C_N$  – необхідна концентрація розчиненого кисню. Наприклад: 2 мг/л.

## 2.5 Модель потрапляння домішки в аеротенк при роботі аератору

Аналіз літературних джерел показав, що в даний час стала приділятися увага проблемі «техногенного» впливу аераторів на середовище всередині аеротенку. Поява таких «домішок» знижує інтенсивність очищення води в аеротенках внаслідок негативного впливу на мікроорганізми. Джерелом потрапляння таких домішок може бути аератор. Найбільш часто такою домішкою є пил, що потрапляє в аератор крізь повітрязабірник. Таким чином, виникає проблема «техногенного» середовища в аеротенку. Тому актуальною є задача прогнозу поширення пилу (або іншої домішки) в аеротенку та визначення зон, де можливі високі концентрації забруднення. Наявність пилу в окремих областях аератору – це негативне явище, що може привести до зменшення активності мікроорганізмів. Тому важливою задачею є оцінка інтенсивності та розмірів можливих областей такого «техногенного» забруднення.

Для рішення цієї прикладної задачі пропонується використання конвективно-дифузійного рівняння переносу домішки в водному середовищі (аеротенку):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial uD}{\partial x} + \frac{\partial (v - w_d)D}{\partial y} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial D}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial D}{\partial y} \right) + \\ & + \sum Q_{Di}(t) \cdot \delta(x - x_i) \cdot \delta(y - y_i) \cdot \delta(z - z_i) \end{aligned}$$

де  $D$  – концентрація пилу;

$u(x, y), v(x, y)$  – компоненти швидкості потоку

$\mu_x, \mu_y$  – коефіцієнти дифузії;

$t$  – час;

$w_d$  – швидкість осадження пилу (домішки) в водному середовищі;

$Q_{Di}(t)$  – місце розташування аератора (джерело емісії пилу), його координати  $x_i, y_i$ .

Для визначення компонент швидкості  $u, v$  використовується модель потенціального руху (2.19). Інтегрування моделюючих рівнянь здійснюється чисельним шляхом. Чисельна модель даного процесу розглядається в Розділі 3.

Дана модель дає можливість виявити масштаб «забруднення» в аеротенку, джерелом якого є аератор. На базі даної інформації можна прийняти рішення – чи потрібно робити попередню очистку повітря, що надходить в аератор, або очистка не потрібна.

## 2.6 Параметри, що необхідні для реалізації моделі роботи аеротенку

Розглянемо параметри, що потрібні для практичного використання запропонованих математичних моделей. Слід підкреслити, що одним з напрямків наукових досліджень в світі є вивчення процесів масопереносу не тільки в аеротенку, але і у вторинних відстійниках, де здійснюється осадження активного мулу після виходу стічних вод з аеротенку (рис. 2.5).

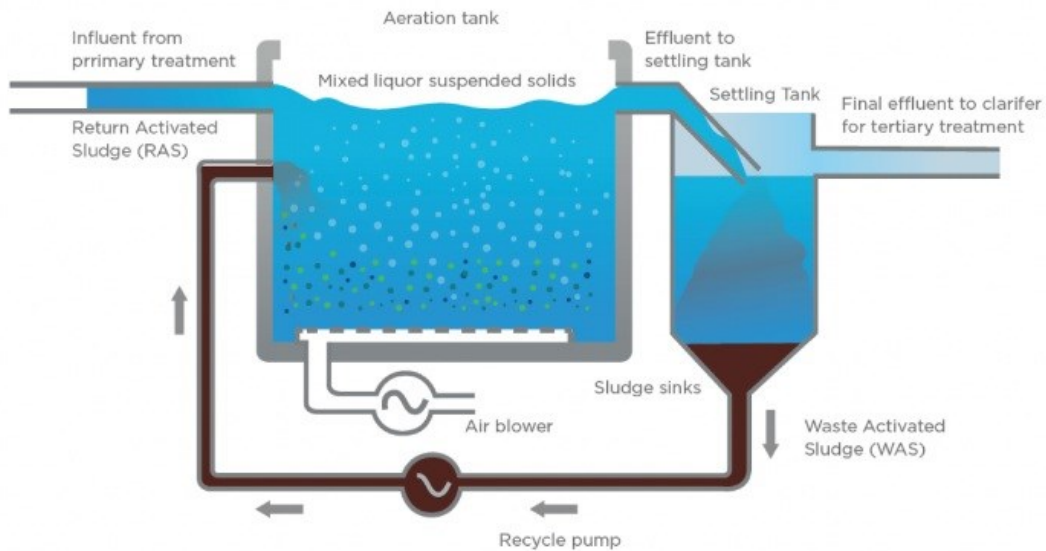


Рисунок 2.5 Схема роботи системи « аеротенк + вторинний відстійник» (<https://www.nchasia.com/en-my/solution/biological-wastewater-treatment/>)

Тому далі розглядаються параметри для системи «аеротенк + вторинний відстійник».

*Коефіцієнти дифузії.* Відомо, що значення цих коефіцієнтів різне по різних напрямкам, тобто,  $\mu_x, \mu_y, \mu_z$  – є різні величини. Але на практиці найбільш частіше, в інженерних розрахунках, використовують таку концепцію  $\mu_x = \mu_y = \mu_z$ . Проблемою визначення цих параметрів є те, що не існує обладнання для «прямого» виміру коефіцієнтів дифузії в потоці. Їх значення визначається «опосередковано» – шляхом вимірювання концентрації домішки в різних точках з подальшим використанням теорії (закон Фіка) для розрахунку коефіцієнтів дифузії. На практиці використовують підхід, коли локальне значення коефіцієнтів дифузії приймається пропорційним локальній швидкості потоку (М. М. Біляєв).

*Діаметр повітряних бульбашок,* що виходять з аератору. Для невеликих швидкостей повітря, згідно Азбелю, розраховується на базі залежності:

$$d = \frac{cV^2}{2g},$$

де  $c$  – коефіцієнт опору ;  
 $V$  – швидкість підйому бульбашки;  
 $g$  – прискорення сили тяжіння.

Згідно МакКоуен та Окун, при невеликих витратах повітря, діаметр бульбашок пропорційний діаметру отвору, крізь який виходять бульбашки. В цілому, середній діаметр  $d$  бульбашки може бути визначений так:

$$d = G^n$$

де  $G$  – витрата повітря;  
 $n$  – показник, що залежить від типу дифузора.

*Швидкість підйому бульбашки.* Цей параметр залежить від діаметру бульбашки. Так, в літературі існують наступні дані:

- для бульбашок, що мають діаметр 0.2–0.6 см, швидкість підйому порядку 23 см/с;
- для бульбашок, що мають діаметр до 1.5 см швидкість підйому порядку 28–30 см/с.
- для бульбашок більшого діаметру швидкість підйому порядку 35–40 см/с.

Лабораторні дослідження показали, що при русі бульбашки її об'єм змінюється – має місце збільшення площі поверхні бульбашки (МакКоуен та Окун). Також, дослідження показують, що не завжди бульбашка має форму сфери.

Експериментальні дослідження (Хабертон, Мортон) показують, що при числі Рейнольдса меншому ніж 300, бульбашки рухаються як «тверда» сфера. При числі Рейнольдса 300–4000 бульбашки мають форму еліпса. При числі Рейнольдса більш 4000 бульбашка має форму типу «сплющений» сфероїд.

*Об'ємний коефіцієнт масопередачі.* Цей параметр залежить від гідродинамічних факторів, розміру бульбашки, швидкості вертикального руху бульбашки. В загальному вигляді, для визначення цього параметру використовують критеріальні рівняння, що мають вигляд (Я. Карелін, Д. Жуков):

$$\text{Nu} = \text{Re}^n \text{Pr}^m,$$

де  $\text{Nu}$  – число Нуссельта;

$\text{Re}$  – число Рейнольдса;

$\text{Pr}$  – число Прандля.

Але дана залежність не враховує вплив глибини аеротенку на значення коефіцієнту масопередачі.

Відомі емпіричні моделі для визначення коефіцієнту масопередачі. Наприклад, для різного типу імпеллерів такі моделі мають вигляд (Botlagunta, Mahendran et al):

$$K_{La} = 0,900 \cdot \left( \frac{Pg}{V} \right)^{0,324} \cdot (Vg)^{0,631} \text{ (Rushton Turbine)}$$

$$K_{La} = 0,254 \cdot \left( \frac{Pg}{V} \right)^{0,161} \cdot (Vg)^{0,484} \text{ (Paddle Impeller)}$$

$$K_{La} = 0,556 \cdot \left( \frac{Pg}{V} \right)^{0,297} \cdot (Vg)^{0,491} \text{ (Marine Turbine)}$$

де  $Pg$  – потужність;  $V$  – об'єм;  $Vg$  – швидкість газового потоку.

При проведенні «пілотних» розрахунків часто використовують значення коефіцієнту масопередачі, що наведені в літературі. Наприклад,  $K_{La}=4$  [1/год],  $K_{La}=3$  [1/год ],  $K_{La}=14$  [1/год ], тощо

*Критична концентрація розчиненого кисню в аеротенку.* Відомо, що швидкість споживання кисню активним мулом практично не залежить від

концентрації розчиненого кисню, доки ця концентрація вище ніж критичне значення. Ця критична концентрація знаходиться в таких межах 1–2 мг/л. В аеротенках, що здійснюють обробку стічних вод при низькій концентрації розчиненого кисню, потрібна висока інтенсивність ступеню змішування. Слід зазначити, що за низької концентрації кисню швидкість споживання забруднювачів зменшується.

*Параметри моделі Monod.* Ці параметри описують безпосередньо процес біологічного очищення. Визначення даних параметрів здійснюється виключно експериментальним шляхом. Аналіз літературних джерел показав, що параметри варіюються в певному діапазоні, що пояснюється різними умовами експерименту та різним складом стічних вод. Наприклад, (Perede, Zamarreto, Meghad, Sh Mardani, Marques, Muhammad H. Al- Malack, M. Лемеш):

$$\mu_{\max} = 0,135 \text{ доб}^{-1}, K_s = 9,75 \text{ (мг}\cdot\text{л}^{-1}\text{)};$$

$$\mu_{\max} = 0,23 - 3,17 \text{ доб}^{-1}, K_s = 13,8 - 508 \text{ мг / л};$$

$$\mu_{\max} = 3,97 \text{ доб}^{-1}, K_s = 74 \text{ (мг}\cdot\text{л}^{-1}\text{)};$$

$$\mu_{\max} = 0,0324 - 0,1095 \text{ доб}^{-1}, K_s = 4612 - 6663 \text{ (мг}\cdot\text{л}^{-1}\text{)};$$

$$\mu_{\max} = 1,04 \text{ доб}^{-1}; K_s = 100 \text{ (мг}\cdot\text{л}^{-1}\text{)};$$

$$r = \frac{dDO}{dt} = fX, \text{ (2.29)}$$

де  $f=0,273 \text{ (доб}^{-1}\text{)}$  (G. Еката).

Відзначимо, що модель (2.29) буде використовуватися далі (Розділ 4) при проведенні чисельного моделювання на базі розроблених CFD моделей.

*Швидкість осадження домішок w.* Для експрес оцінювання даного параметру можна використовувати формулу Стокса (тут та далі матеріали Козачини В. А.):

$$w = \sqrt{\frac{4g}{3C_D} \frac{(\rho_p - \rho_l)}{\rho_l} d_p^3},$$

де  $w$  – швидкість осадження частинки;

$C_D$  – коефіцієнт опору, який залежить від числа Рейнольдса;

$\rho_p, \rho_l$  – відповідно густина частинок і густина рідини;

$d_p$  – діаметр частинок.

Інший підхід – використання емпіричних моделей, наприклад, моделі Vesilind:

$$w = w_0 \cdot e^{-kX},$$

де  $X$  – концентрація,  $w_0$  – максимальна швидкість осадження,  $k$  – константа.

Можна бачити, що дана емпірична модель використовує лише два параметра, що потрібно визначити перед її застосуванням на практиці. Це, в певній мірі, є досить важливим для прикладних розрахунків.

Більш складною моделлю є модель Malcherek. Модель має вигляд:

$$w = q \cdot X^b \frac{1 + cG}{1 + bG^2},$$

де  $q, b, c, d$  – параметри;  $G$  – градієнт швидкості течії рідини;  $w$  – швидкість осадження при концентрації  $X$ .

Як можна бачити, модель Malcherek включає в себе більшу кількість емпіричних параметрів, що потребує їх визначення для конкретних умов та створює труднощі на етапі практичного використання моделі.

Спрощеною моделлю є модель Cho:

$$w = k \frac{e^{-nX}}{X},$$

де  $k, n$  – емпіричні константи;  $X$  – концентрація.

Модель Cho показує, що швидкість осадження обернено пропорційна концентрації домішки в очисній споруді.

Модель Rasmussen and Larsen «пов'язує» два важливих параметри: максимальна та мінімальна швидкість осадження домішки:

$$w = w_0 \cdot e^{(BX + \Theta G)} + \Gamma,$$

де  $w_0$  – максимальна швидкість осадження;

$B, \Theta$  – емпіричні константи;  $\Gamma$  – мінімальна швидкість осадження.

Але використання двох емпіричних констант створює труднощі при застосуванні цієї моделі на практиці: потрібно провести дослідження, щоб визначити ці константи для певних умов.

Певне «фізичне» наповнення має модель Takács I.:

$$w = w_0 \left( e^{-K_1(C - C_{\min})} - e^{-K_2(C - C_{\min})} \right),$$

де  $C_{\min}$  – концентрація домішок, що не осаджуються;

$w_0$  – максимальна швидкість осадження домішки.

$K_1, K_2$  – експериментальні константи;

Аналіз моделі Takács I. показує, що зменшення швидкості осадження має експоненціальну залежність від концентрації домішки в потоці.

## Висновки до Розділу 2

1. Запропоновано комплексну двовимірну модель для аналізу біологічного очищення стічних вод в аеротенку; модель дає можливість моделювати процес біологічного очищення стічних вод з урахуванням нерівномірного поля концентрації активного мулу, субстрату, розчиненого

кисню в споруді; модель «замикається» рівнянням Monod; особливістю моделі біологічного очищення є розрахунок поширення повітряних бульбашок в аеротенку від аератора та врахування переходу кисню від бульбашки до стічних вод.

2. Запропоновано комплексну тривимірну модель для аналізу біологічного очищення стічних вод в аеротенку; модель дає можливість моделювати процес біологічного очищення стічних вод з урахуванням нерівномірного поля концентрації активного мулу, субстрату, розчиненого кисню в споруді; модель «замикається» рівнянням Monod; особливістю моделі біологічного очищення є розрахунок поширення повітряних бульбашок в аеротенку від аератора та врахування переходу кисню від бульбашки до стічних вод.

3. Запропоновано математичну модель техногенного забруднення аеротенку внаслідок емісії пилу в споруду при роботі аератора.

4. Для рішення задачі гідродинаміки в аеротенку запропоновано використання двох фундаментальних рівнянь механіки суцільного середовища – моделі потенціального руху та рівнянь Ейлера.

5. Запропоновано математичну модель для рішення задачі по визначенню раціонального місця розташування аератора в аеротенку. Моделюючим рівнянням є спряжене рівняння масоперносу (теорія Г. Марчука).

6. Розглянуто параметри, що необхідні для практичного використання моделей біологічного очищення стічних вод в аеротенках.

## РОЗДІЛ 3 ЧИСЕЛЬНІ МОДЕЛІ ДЛЯ ОЦІНЮВАННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ РОБОТИ АЕРОТЕНКУ

В розділі розглядається побутова чисельних моделей для рішення задач масопереносу та гідродинаміки в аеротенку на базі кінцево-різницевих схем.

### 3.1 2D Чисельні моделі масопереносу в аеротенку

Розглянемо побудову чисельних 2D моделей масопереносу в аеротенку. Для чисельного інтегрування моделюючих рівнянь використовується прямокутна різницева сітка, значення шуканих функцій визначаються в центрах контрольних елементів.

Розглянемо рівняння переносу субстрату в аеротенку:

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial uS}{\partial x} + \frac{\partial vS}{\partial y} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial S}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial S}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

На першому етапі побудови чисельної моделі здійснюється розщеплення на диференціальному рівні. Рівняння переносу розщеплюється за фізичними процесами (конвекція + дифузія) (модель № 1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial uS}{\partial x} + \frac{\partial vS}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial S}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial S}{\partial y} \right). \end{aligned}$$

В даній системі рівнянь, перше рівняння описує рух вздовж траєкторій, а друге рівняння описує перенос функції  $S$  за рахунок дифузії.

Здійснимо апроксимацію конвективних похідних наступним чином:

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

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

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

$$\frac{\partial v^- S}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1}^- S_{i,j+1} - v_{i,j}^- S_{i,j}}{\Delta y} = L_y^- S^{n+1}.$$

Тут використані такі перетворення:

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

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

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

На наступному етапі будуються кінцево-різницеві рівняння таким чином:

– крок 1 ( $k = n + 1/2$ ), різницеве рівняння наступне:

$$\frac{S_{i,j}^k - S_{i,j}^n}{\Delta t} + L_x^+ S^k + L_y^+ S^k = 0;$$

– крок 2, різницеве рівняння наступне:

$$\frac{S_{i,j}^{n+1} - S_{i,j}^k}{\Delta t} + L_x^- S^{n+1} + L_y^- S^{n+1} = 0.$$

Друге рівняння з системи розщеплення (рівняння дифузії) інтегрується наступним чином («схема умовної апроксимації»):

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

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

Відзначимо, що концентрація субстрату визначається за явною формулою на кожному кроці розщеплення.

Розроблено комплекс комп'ютерних програм CHSU, що реалізує розрахунок концентрації субстрату в аеротенку на базі побудованої чисельної моделі:

- *CLE1* – розрахунок рівняння конвекції (перший крок розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CLE2* – розрахунок рівняння конвекції (другий крок розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CLE3* – розрахунок рівняння дифузії (перший крок розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CLE4* – розрахунок рівняння дифузії (другий крок розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CL11* – реалізація граничних умов при розрахунку рівнянь конвекції (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CL12* – реалізація граничних умов при розрахунку рівнянь дифузії (підпрограма типу SUBROUTINE);

➤ *CLM2* – рішення рівнянь Monod (підпрограма типу SUBROUTINE);

➤ *CPI* – презентація результатів комп'ютерного моделювання.

Час розрахунку на базі даної чисельної моделі 3 с.

Для організації комп'ютерного експерименту потрібні такі дані:

- геометрична форма аеротенку;
- розміри аеротенку;
- витрата стічних вод (швидкість потоку стічних вод на вході в аеротенк);
- місце потрапляння субстрату в аеротенк;
- місце виходу субстрату з аеротенку;
- концентрація субстрату в стічних водах, що потрапляють в аеротенк;
- концентрація субстрату, що подається в аеротенк;
- параметри моделі Monod;
- крок за часом;
- кількість ітерацій;
- розмір різницевої сітки.

Результат «роботи» даної чисельної моделі та комп'ютерної програми, що її реалізує – поле концентрації субстрату в аеротенку.

Для побудови чисельної моделі масопереносу активного мулу (модель № 2) використовується наступне моделююче рівняння:

$$\begin{aligned} \frac{\partial X}{\partial t} + \frac{\partial uX}{\partial x} + \frac{\partial vX}{\partial y} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial X}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial X}{\partial y} \right). \end{aligned}$$

Похідні другого порядку апроксимуються наступним чином:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial X}{\partial x} \right) \approx \tilde{\mu}_{x_1} \frac{X_{i+1,j}^{n+1} - X_{ij}^{n+1}}{\Delta x^2} - \tilde{\mu}_{x_2} \frac{X_{i,j}^{n+1} - X_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{xx}^- X^{n+1} + M_{xx}^+ X^{n+1},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial X}{\partial y} \right) \approx \tilde{\mu}_{y_1} \frac{X_{i,j+1}^{n+1} - X_{ij}^{n+1}}{\Delta y^2} - \tilde{\mu}_{y_2} \frac{X_{i,j}^{n+1} - X_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} = M_{yy}^- X^{n+1} + M_{yy}^+ X^{n+1}.$$

З урахуванням цих апроксимацій та апроксимацій, що були наведені вище для конвективних похідних, записуємо таку схему розщеплення (чотирикорова змінно-трикутна схема):

– на першому кроці ( $k = \frac{1}{4}$ ) різницева рівняння має вигляд:

$$\begin{aligned} & \frac{X_{ij}^{n+k} - X_{ij}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^+ X^{n+k} + L_y^+ X^{n+k}) = \\ & = 0.25 \cdot (M_{xx}^+ X^{n+k} + M_{xx}^- X^n + M_{yy}^+ X^{n+k} + M_{yy}^- X^n); \end{aligned}$$

– на другому кроці ( $k = n + \frac{1}{2}; c = n + \frac{1}{4}$ ) різницева рівняння має вигляд:

$$\begin{aligned} & \frac{X_{ij}^k - X_{ij}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^- X^k + L_y^- X^k) = \\ & = 0.25 \cdot (M_{xx}^+ X^c + M_{xx}^- X^k + M_{yy}^+ X^c + M_{yy}^- X^k); \end{aligned}$$

– на третьому кроці ( $k = n + \frac{3}{4}; c = n + \frac{1}{2}$ ) різницева рівняння має вигляд:

$$\begin{aligned} & \frac{X_{ij}^k - X_{ij}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^+ X^k + L_y^- X^k) = \\ & = 0.25 \cdot (M_{xx}^+ X^k + M_{xx}^- X^c + M_{yy}^+ X^c + M_{yy}^- X^k); \end{aligned}$$

– на четвертому кроці ( $k = n + 1; c = n + \frac{3}{4}$ ) різницева рівняння має:

$$\frac{X_{ij}^k - X_{ij}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^- X^k + L_y^+ X^k) =$$

$$= 0.25 \cdot (M_{xx}^+ X^c + M_{xx}^- X^k + M_{yy}^+ X^k + M_{yy}^- X^c).$$

На кожному кроці розщеплення розрахунок невідомої концентрації активного мулу здійснюється за методом «рухомого» розрахунку, тобто за явною формулою.

Розроблено комплекс комп'ютерних програм *CHAM*, що реалізує розрахунок концентрації активного мулу в аеротенку на базі побудованої чисельної моделі:

- *CSE1* – розрахунок рівняння переносу (перший крок розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE)
- *CSE2* – розрахунок рівняння переносу (другий крок розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE)
- *CSE3* – розрахунок рівняння переносу (третій крок розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE)
- *CSE4* – розрахунок рівняння переносу (четвертий крок розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE)
- *CS11* – реалізація граничних умов при розрахунку рівнянь переносу (підпрограма типу SUBROUTINE) ;
- *CS12* – рішення рівнянь Monod (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CPI* – презентація результатів комп'ютерного моделювання.

Час розрахунку на базі даної чисельної моделі 4 с.

Для організації комп'ютерного експерименту потрібні такі дані:

- геометрична форма аеротенку;
- розміри аеротенку;
- витрата стічних вод (швидкість потоку стічних вод на вході в аеротенк);
- місце потрапляння активного мулу в аеротенк;
- місце виходу активного мулу з аеротенку;
- інтенсивність подачі активного мулу в аеротенк;

- крок за часом;
- кількість ітерацій;
- параметри моделі Monod;
- розмір різницевої сітки.

Результат «роботи» даної чисельної моделі та комп'ютерної програми, що її реалізує – поле концентрації активного мулу в аеротенку.

Для побудови чисельної моделі масопереносу розчиненого кисню (модель № 3) використовується таке моделююче рівняння:

$$\begin{aligned} \frac{\partial DO}{\partial t} + \frac{\partial uDO}{\partial x} + \frac{\partial vDO}{\partial y} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial DO}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial DO}{\partial y} \right). \end{aligned}$$

Далі використовується наступна схема розщеплення (двокрокова змінно-трикутна схема):

- на першому кроці ( $k = \frac{1}{2}$ ) різницеве рівняння має вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{DO_{ij}^{n+k} - DO_{ij}^n}{\Delta t} + (L_x^+ DO^{n+k} + L_y^+ DO^{n+k}) = \\ = 0.5 \cdot (M_{xx}^+ DO^{n+k} + M_{xx}^- DO^n + M_{yy}^+ DO^{n+k} + M_{yy}^- DO^n); \end{aligned}$$

- на другому кроці ( $k = n; c = n + \frac{1}{2}$ ) різницеве рівняння має вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{DO_{ij}^k - DO_{ij}^c}{\Delta t} + (L_x^- DO^k + L_y^- DO^k) = \\ = 0.5 \cdot (M_{xx}^+ DO^c + M_{xx}^- DO^k + M_{yy}^+ DO^c + M_{yy}^- DO^k). \end{aligned}$$

Розроблено комплекс комп'ютерних програм *CHDO*, що реалізує розрахунок концентрації розчинного кисню в аеротенку на базі побудованої чисельної моделі:

- *CDE1* – розрахунок рівняння переносу розчиненого кисню (перший крок розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CDE2* – розрахунок рівняння переносу розчиненого кисню (другий крок розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CD11* – реалізація граничних умов при розрахунку рівнянь переносу розчиненого кисню (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CD12* – рішення рівняння масопередачі (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CPI* – презентація результатів комп'ютерного моделювання.

Час розрахунку на базі даної чисельної моделі 3 с.

Для організації комп'ютерного експерименту потрібні такі дані:

- геометрична форма аеротенку;
- розміри аеротенку;
- витрата стічних вод (швидкість потоку стічних вод на вході в аеротенк);
- місце виходу розчиненого кисню з аеротенку;
- місце розташування аератору;
- витрата аератору;
- параметри масопередачі;
- крок за часом;
- кількість ітерацій;
- розмір різницевої сітки.

Результат «роботи» даної чисельної моделі та комп'ютерної програми, що її реалізує – поле концентрації розчиненого кисню в аеротенку.

Аналогічні кінцево-різницеві залежності використовуються для побудови чисельної моделі руху повітряних бульбашок від аератору (модель № 3). Розроблено комплекс комп'ютерних програм *CHBU*, що реалізує розрахунок

концентрації повітряних бульбашок в аеротенку на базі побудованої чисельної моделі:

- *CBE1* – розрахунок рівняння переносу повітряних бульбашок (перший крок розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CBE2* – розрахунок рівняння переносу повітряних бульбашок (другий крок розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CB11* – реалізація граничних умов при розрахунку рівнянь переносу повітряних бульбашок (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CB12* – рішення рівняння масопередачі (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CPI* – презентація результатів комп'ютерного моделювання.

Час розрахунку на базі даної чисельної моделі 3 с.

Для організації комп'ютерного експерименту потрібні такі дані:

- геометрична форма аеротенку;
- розміри аеротенку;
- витрата стічних вод (швидкість потоку стічних вод на вході в аеротенк);
- місце виходу повітряних бульбашок від аератору;
- кількість повітряних бульбашок, що виходять з аератору в одиницю часу;
- місце розташування аератору;
- параметри масопередачі;
- крок за часом;
- кількість ітерацій;
- розмір різницевої сітки.

Результат «роботи» даної чисельної моделі та комп'ютерної програми, що її реалізує – поле концентрації повітряних бульбашок в аеротенку.

Основна програма MAIN.Prg здійснює координацію «роботи» всіх перелічених чисельних моделей та підпрограм. В основну програму MAIN.Prg також входять підпрограми, що реалізують рішення задачі гідродинаміки (тобто, здійснюють комп'ютерну реалізацію розроблених чисельних моделей

гідродинаміки). Побудова чисельних моделей гідродинаміки розглядається далі.

Для реалізації усіх побудованих чисельних моделей потрібно знати поле швидкості потоку стічних вод в аеротенку. Це поле швидкості визначається після рішення задачі гідродинаміки.

Алгоритм рішення задачі наступний:

1. Здійснюється введення початкових даних (на момент часу  $t=0$ ) в основну комп'ютерну програму MAIN.Prg.
2. Здійснюється рішення чисельної моделі гідродинаміки.
3. Визначається поле швидкості потоку в аеротенку.
4. Здійснюється для часового кроку  $dt$  рішення чисельних моделей переносу активного мулу, субстрату, повітряних бульбашок, розчиненого кисню в аеротенку.
5. Здійснюється рішення рівнянь Monod та визначається нове значення полів концентрації активного мулу, субстрату, повітряних бульбашок, розчиненого кисню на момент часу  $t=t+dt$ .
6. Здійснюється друк результатів комп'ютерного моделювання.
7. Розрахунок повторюється, починаючи з кроку №4.

Використання розроблених чисельних моделей та створених комп'ютерних програм дозволяє проектувальнику отримати повну картину щодо розподілу полів концентрації активного мулу, субстрату, розчиненого кисню та повітряних бульбашок в аеротенку.

### 3.2 Чисельна модель поширення пилу від аератора

Як відзначалося вище, з повітрям, що подає аератор, в аеротенк потрапляють різного роду домішки, найчастіше – пил. Тому виникає задача прогнозування областей такого пилового забруднення стічних вод в

аеротенку. Для рішення цієї прикладної задачі пропонується використання рівняння конвективно-дифузійного переносу домішки в аеротенку:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial uD}{\partial x} + \frac{\partial (v - w_d)D}{\partial y} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial D}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial D}{\partial y} \right) + \\ & + \sum Q_i(t) \cdot \delta(x - x_i) \cdot \delta(y - y_i); \end{aligned}$$

На першому етапі здійснюється розщеплення рівняння переносу домішки на систему з двох одновимірних диференціальних рівнянь:

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial uD}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial D}{\partial x} \right), \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial vD}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial D}{\partial y} \right), \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial D}{\partial t} = \sum Q_i(t) \cdot \delta(x - x_i) \cdot \delta(y - y_i)$$

Рівняння (3.1) описує міграцію домішки вздовж осі «Х», а рівняння (3.2) – міграцію домішки вздовж осі «Y». Виконаємо наступну апроксимацію похідних, що входять в дане рівняння (М. Згуровський, В. Скопечкий, В. Хрущ, М. Біляєв):

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

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

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

$$\frac{\partial u^+ D}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j}^+ D_{ij}^{n+1} - u_{ij}^+ D_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^+ D^{n+1},$$

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

$$\frac{\partial v^+ D}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1}^+ D_{ij}^{n+1} - v_{ij}^+ D_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^+ D^{n+1},$$

$$\frac{\partial v^- D}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1}^- D_{i,j+1}^{n+1} - v_{ij}^- D_{ij}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^- D^{n+1}.$$

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

Для апроксимації похідних другого порядку використовуються такі залежності:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial D}{\partial x} \right) \approx \tilde{\mu}_{x_1} \frac{D_{i+1,j}^{n+1} - D_{ij}^{n+1}}{\Delta x^2} - \tilde{\mu}_{x_2} \frac{D_{i,j}^{n+1} - D_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{xx}^- D^{n+1} + M_{xx}^+ D^{n+1},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial D}{\partial y} \right) \approx \tilde{\mu}_{y_1} \frac{D_{i,j+1}^{n+1} - D_{ij}^{n+1}}{\Delta y^2} - \tilde{\mu}_{y_2} \frac{D_{i,j}^{n+1} - D_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} = M_{yy}^- D^{n+1} + M_{yy}^+ D^{n+1}.$$

Тут використано наступне позначення:  $v = v - w_d$ .

Далі записується змінно-трикутна різницева схема (В. К. Хрущ, М. М. Біляєв) для чисельного інтегрування кожного одновимірного рівняння (модель № 4).

Для першого одновимірного рівняння:

–Крок № 1:

$$\frac{D_{i,j}^k - D_{i,j}^n}{\Delta t} + L_x^+ D^k = M_{xx}^+ D^k + M_{xx}^- D^n;$$

–Крок № 2 :

$$\frac{D_{i,j}^{n+1} - D_{i,j}^k}{\Delta t} + L_x^- D^{n+1} = M_{xx}^+ D^n + M_{xx}^- D^{n+1}.$$

Для другого одновимірного рівняння масопереносу:

– Крок № 1:

$$\frac{D_{i,j}^k - D_{i,j}^n}{\Delta t} + L_y^+ C^k = M_{yy}^+ C^k + M_{yy}^- C^n;$$

– Крок № 2:

$$\frac{D_{i,j}^{n+1} - D_{i,j}^k}{\Delta t} + L_y^- D^{n+1} = M_{yy}^+ D^n + M_{yy}^- D^{n+1}.$$

Визначення невідомого значення концентрації пилу здійснюється на базі явної формули на кожному розрахунковому кроці. Для чисельного інтегрування рівняння, що описує зміну концентрації пилу внаслідок дії джерела емісії, використовується метод Ейлера.

Розроблено комплекс комп'ютерних програм *CHDUS*, що реалізує розрахунок концентрації пилу в аеротенку на базі побудованої чисельної моделі:

- *CHE1* – розрахунок рівняння переносу пилу (перше рівняння розщеплення, перший крок, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CHE2* – розрахунок рівняння переносу пилу (друге рівняння розщеплення, другий крок, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CH11* – реалізація граничних умов при розрахунку першого рівняння розщеплення (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CH22* – розрахунок рівняння переносу пилу (друге рівняння розщеплення, перший крок, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CH23* – розрахунок рівняння переносу пилу (друге рівняння розщеплення, другий крок, підпрограма типу SUBROUTINE);

➤ *CH4* – реалізація граничних умов при розрахунку другого рівняння розщеплення (підпрограма типу SUBROUTINE);

➤ *CPI* – презентація результатів комп'ютерного моделювання.

Час розрахунку на базі даної чисельної моделі 3 с.

Для організації комп'ютерного експерименту потрібні такі дані:

- геометрична форма аеротенку;
- розміри аеротенку;
- витрата стічних вод (швидкість потоку на вході в аеротенк) ;
- місце виходу пилу від аератору;
- інтенсивність емісії пилу від аератору;
- місце розташування аератору;
- крок за часом;
- кількість ітерацій;
- розмір різницевої сітки.

Результат «роботи» даної чисельної моделі та комп'ютерної програми, що її реалізує – поле концентрації пилу в аеротенку. Для реалізації побудованої чисельної моделі потрібно знати поле швидкості потоку стічних вод в аеротенку. Це поле швидкості визначається після рішення задачі гідродинаміки. Для чисельного інтегрування рівнянь (2.5)-(2.9) використовується метод Ейлера.

Алгоритм рішення задачі наступний:

1. Здійснюється введення початкових даних (на момент часу  $t=0$ ) в основну комп'ютерну програму MAIN.Prg.

2. Здійснюється рішення чисельної моделі гідродинаміки.

3. Визначається поле швидкості потоку в аеротенку.

4. Здійснюється для часового кроку  $dt$  рішення чисельної моделі переносу пилу в аеротенку.

5. Визначається нове значення поля концентрації пилу на момент часу  $t=t+dt$ .

6. Здійснюється друк результатів комп'ютерного моделювання.

7. Розрахунок повторюється, починаючи з кроку № 4.  
Витрати комп'ютерного часу на рішення цієї задачі складає 2 с.

### 3.3 3D Чисельні моделі масопереносу в аеротенку

Для чисельного інтегрування тривимірних рівнянь масопереносу активного мулу, субстрату, розчиненого кисню та повітряних бульбашок використовується змінно-трикутна кінцево-різницева схема розщеплення. Принцип побудови даної чисельної моделі розглянемо на рівнянні масопереносу загального вигляду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right), \end{aligned}$$

де  $C$  – концентрація (активного мулу, субстрату, розчиненого кисню, повітряних бульбашок).

Для розробки чисельної моделі здійснюється таке розщеплення моделюючого рівняння:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right). \end{aligned}$$

Для побудови 3D чисельної моделі масопереносу використовується змінно-трикутна різницева схема. Робляться такі перетворення:

$$\vec{V}^+ = \{u^+, v^+, w^+\}, \vec{V}^- = \{u^-, v^-, w^-\},$$

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

$$\bar{\mu}_{1x} = \frac{\mu}{1 + \frac{u^+ \Delta x}{\mu}}, \bar{\mu}_{1y} = \frac{\mu}{1 + \frac{v^+ \Delta y}{\mu}}, \bar{\mu}_{1z} = \frac{\mu}{1 + \frac{w^+ \Delta z}{\mu}},$$

$$\bar{\mu}_{2x} = \frac{\mu}{1 - \frac{u^- \Delta x}{\mu}}, \bar{\mu}_{2y} = \frac{\mu}{1 - \frac{v^- \Delta y}{\mu}}, \bar{\mu}_{2z} = \frac{\mu}{1 - \frac{w^- \Delta z}{\mu}}.$$

Використовуючи позначення різницевих операторів, будується така чисельна модель процесу конвективного та дифузійного переносу:

– крок № 1 ( $k=1/4$ ):

$$\frac{C_{ij}^{n+k} - C_{ij}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} \left( L_x^+ C^{n+k} + L_y^+ C^{n+k} + L_z^+ C^{n+k} \right) = 0;$$

– крок № 2 ( $k=n+1/2$ ;  $c=n+1/4$ ):

$$\frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} \left( L_x^- C^k + L_y^- C^k + L_z^- C^k \right) = 0;$$

– крок № 3 ( $k=n+3/4$ ;  $c=n+1/2$ ):

$$\frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left( \begin{array}{l} M_{xx}^- C^c + M_{xx}^+ C^k + \\ + M_{yy}^- C^c + M_{yy}^+ C^k + \\ + M_{zz}^- C^c + M_{zz}^+ C^k \end{array} \right);$$

– крок № 4 ( $k=n+1$ ;  $c=n+3/4$ ):

$$\frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + \\ + M_{yy}^- C^k + M_{yy}^+ C^c + \\ + M_{zz}^- C^k + M_{zz}^+ C^c \end{pmatrix}.$$

На кожному кроці розрахунок невідомого значення концентрації здійснюється на базі явних формул.

Розроблено комплекс комп'ютерних програм *CH3D*, що реалізує розрахунок концентрації активного мулу, субстрату, повітряних бульбашок, розчиненого кисню в аеротенку на базі побудованої чисельної моделі:

- *CH3* – розрахунок рівняння масопереносу (перший крок, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CHE2* – розрахунок рівняння масопереносу (другий крок, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CHE1* – розрахунок рівняння масопереносу (третій крок, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CHE2* – розрахунок рівняння масопереносу (четвертий крок, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CH11* – реалізація граничних умов (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CP31* – презентація результатів комп'ютерного моделювання.

Час розрахунку на базі даної чисельної моделі 3 с.

Для організації комп'ютерного експерименту потрібні такі дані:

- геометрична форма аеротенку;
- розміри аеротенку;
- витрата стічних вод (швидкість потоку стічних вод на вході в аеротенк);
- місце виходу повітряних бульбашок від аератору;
- концентрація (активного мулу, субстрату, розчиненого кисню) на вході в аеротенк;
- місце розташування аератору;
- крок за часом;
- кількість ітерацій;

- розмір різницевої сітки.

Результат «роботи» даної чисельної моделі та комп'ютерної програми, що її реалізує – поле концентрації активного мулу, субстрату, повітряних бульбашок, розчиненого кисню в аеротенку. Для реалізації побудованої чисельної моделі потрібно знати поле швидкості потоку стічних вод в аеротенку. Це поле швидкості визначається після рішення задачі гідродинаміки.

Відзначимо, що при чисельному рішенні рівнянь (2.14)-(2.18) використовується метод Ейлера.

здійснюється за допомогою методу Ейлера.

Алгоритм рішення задачі аналогічний алгоритму, що показано раніше для рішення 2D задач масопереносу.

### **3.4 2D Чисельні моделі гідродинаміки для аналізу поля швидкості стічних вод в аеротенку**

Система аерації забезпечує подачу повітря в аеротенк (рис. 3.1), далі, внаслідок процесу масопереносу кисень потрапляє від повітряних бульбашок в водне середовище аеротенка. Особливо важливим процесом, що впливає на формування концентраційних полів розчиненого кисню, повітряних бульбашок, активного мулу та субстрату, є гідродинаміка в очисній споруді. Врахування гідродинаміки є однією з переваг будь-якої математичної моделі, що розробляється для аналізу ефективності очищення води в аеротенках.

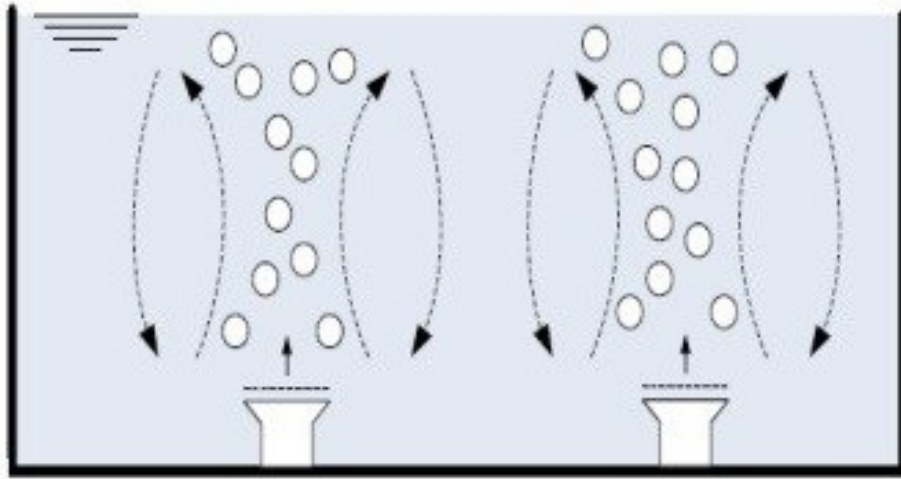


Рисунок 3.1 – Схема подачі повітря з дифузorzів в аеротенк (Prof. Alberto CUOCI Company Supervisor: Dr. Thomas HOEHNE Candidate: Tural MAMEDOV)

Модель гідродинаміки, для моделювання двовимірної течії стічних вод в аеротенку базується на використанні рівняння Лапласа для потенціалу швидкості.

Для чисельного інтегрування рівняння Лапласу для потенціалу швидкості здійснюється наступна апроксимація похідних:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} = \frac{P_{i+1,j} - 2P_{i,j} + P_{i-1,j}}{\Delta x^2},$$

$$\frac{\partial^2 P}{\partial y^2} = \frac{P_{i,j+1} - 2P_{i,j} + P_{i,j-1}}{\Delta y^2},$$

де  $\Delta x, \Delta y$  – крок різницевої сітки за кожним координатним напрямом.

З урахуванням такої апроксимації рівняння Лапласу має вигляд:

$$\frac{P_{i+1,j} - 2P_{i,j} + P_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{P_{i,j+1} - 2P_{i,j} + P_{i,j-1}}{\Delta y^2} = 0.$$

Невідоме значення потенціалу швидкості  $P_{i,j}$  (розраховується в центрах контрольних елементів) визначається так:

$$P_{i,j} = \left[ \frac{P_{i+1,j} + P_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{P_{i,j+1} + P_{i,j-1}}{\Delta y^2} \right] / Z ,$$

$$\text{де } Z = \left( \frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} \right).$$

Таким чином, визначення значення потенціалу швидкості в контрольних елементах базується на використанні даної залежності.

В контрольних елементах, що відносяться до твердих меж, використовуються «фіктивні» комірки.

Розрахунок зупиняється при умові:

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

де  $P_{i,j}^{n+1}$  – «нове» наближення потенціалу швидкості;

$P_{i,j}^n$  – «попереднє» наближення потенціалу швидкості;

$\varepsilon$  – мале число (приймалося,  $\varepsilon \approx 0,001$ ).

Для установлення рішення потребується порядку 400-600 ітерацій.

Для початку розрахунку приймалося, що в розрахунковій області має місце умова  $P_{ij}=0$ .

Компоненти вектора швидкості потоку розраховуються після визначення поля потенціалу швидкості потоку:

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

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

Поле швидкості потоку стічних вод далі використовується для рішення задачі масопереносу, тобто визначення концентраційних полів активного мулу, субстрату, розчиненого кисню та концентрації повітряних бульбашок в аеротенку.

Розроблені комп'ютерні програми, що реалізують рішення задачі гідродинаміки на базі побудованої чисельної моделі:

- *CPP1* – розрахунок поля потенціалу швидкості (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CP4* – реалізація граничних умов при розрахунку потенціалу швидкості (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CP7* – розрахунок поля швидкості потоку в аеротенку (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CP1* – презентація результатів комп'ютерного моделювання.

Час розрахунку на базі даної чисельної моделі 2 с.

Для організації комп'ютерного експерименту потрібні такі дані:

- геометрична форма аеротенку;
- розміри аеротенку;
- швидкість потоку стічних вод на вході в аеротенк;
- місце виходу потоку з аеротенку;
- місце входу потоку в аеротенк;
- крок за часом;
- кількість ітерацій;
- розмір різницевої сітки.

Результат «роботи» даної чисельної моделі та комп'ютерної програми, що її реалізує – поле швидкості потоку в аеротенку, що далі використовується для рішення задачі масопереносу.

### 3.5 3D Чисельні моделі гідродинаміки для аналізу поля швидкості стічних вод в аеротенку

Для побудови 3D чисельної моделі гідродинаміки на базі рівняння для потенціалу швидкості використовується ідея встановлення рішення за часом. Для цього рівняння для потенціалу швидкості записується так:

$$\frac{\partial P}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2}, \quad (3.3)$$

де  $\eta$  – фіктивний час.

Відомо, що при  $\eta \rightarrow \infty$  рішення цього рівняння наближається до рішення рівняння Лапласа.

Далі використовується змінно-трикутний метод А. Самарського. Різницеві рівняння мають вигляд:

1. Крок № 1:

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

2. Крок № 2:

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

Розрахунок зупиняється при умові:

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

де  $\varepsilon$  – мале число (наприклад, 0,001);  $n$  – номер ітерації (крок по фіктивному «часу»).

Після визначення 3D поля потенціалу швидкості розраховуються компоненти вектора швидкості потоку стічних вод на гранях контрольних елементів:

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

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

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

Розроблено комп'ютерні програми, що реалізують рішення задачі гідродинаміки на базі побудованої чисельної моделі:

- *C3* – розрахунок поля потенціалу швидкості, перший крок (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *C23* – розрахунок поля потенціалу швидкості, другий крок (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CP4* – реалізація граничних умов при розрахунку 3D потенціалу швидкості (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CP77* – розрахунок поля швидкості потоку в аеротенку (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CP31* – презентація результатів комп'ютерного моделювання.

Час розрахунку на базі даної чисельної моделі 2 с.

Для організації комп'ютерного експерименту потрібні такі дані:

- геометрична форма аеротенку;

- розміри аеротенку;
- швидкість потоку стічних вод на вході в аеротенк ;
- місце виходу потоку з аеротенку;
- місце входу потоку в аеротенк;
- крок за часом;
- кількість ітерацій;
- розмір різницевої сітки.

Результат «роботи» даної чисельної моделі та комп'ютерної програми, що її реалізує – поле швидкості потоку в аеротенку, що далі використовується для рішення задачі масопереносу.

### **3.6 Чисельні моделі рішення задачі про обґрунтування вибору місця розташування аератору в аеротенку**

Рішення задачі по визначенню раціонального місця розташування аератору в аеротенку складається з двох етапів:

1. Етап № 1 – рішення задачі гідродинаміки та визначення поля швидкості потоку стічних вод в аеротенку.
2. Рішення рівняння, спряженого рівнянню масопереносу.

Рішення задачі гідродинаміки базується на чисельному інтегруванні рівнянь Ейлера (Розділ 2). Для розрахунку вихрових течій ідеальної нестисливої рідини будемо використовувати рознесену прямокутну різницеву сітку. Функцію струму будемо визначати в вузлах різницевих комірок, вихор – в центрах різницевих комірок. Компоненти швидкості визначаються на сторонах різницевих комірок.

Для побудови чисельної моделі гідродинаміки використовуються рівняння Ейлера, які записані в формі Громеки-Лемба:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = -u \frac{\partial \omega}{\partial x} - v \frac{\partial \omega}{\partial y} = -\bar{V} \cdot (\bar{\nabla} \omega),$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega,$$

де  $\omega$  – вихор;

$\bar{V}$  – вектор швидкості потоку;

$\psi$  – функція течії.

Для чисельного інтегрування першого рівняння системи використовуються різницеві рівняння для розрахунку вихору, які на кожному кроці розщеплення мають вигляд (В. К. Хрущ, М. М. Біляєв):

- на першому кроці:

$$\frac{\omega_{i,j}^{n+1/2} + \omega_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{u_{i+1,j}^+ \omega_{i,j}^{n+1/2} - u_{i+1,j}^+ \omega_{i-1,j}^{n+1/2}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1}^+ \omega_{i,j} - v_{i,j-1}^+ \omega_{i,j-1}}{\Delta y} = 0;$$

- на другому кроці:

$$\frac{\omega_{ij}^{n+1} - \omega_{ij}^{n+1}}{\Delta t} + \frac{u_{i+1,j}^- \omega_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^- \omega_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1}^- \omega_{i,j+1}^{n+1} - v_{i,j-1}^- \omega_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} = 0.$$

Значення вихору на першому та другому кроці розщеплення визначається за формулою рухомого рахунку.

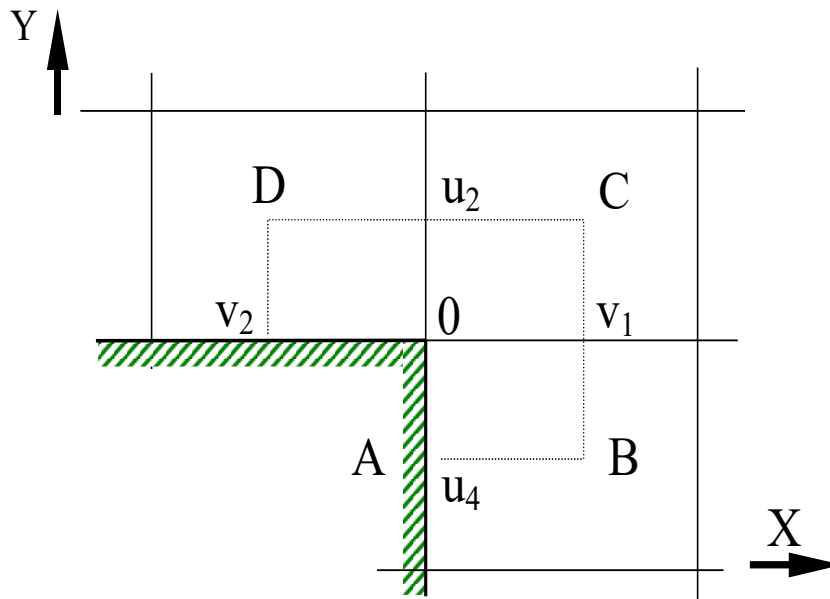


Рисунок 3.2 – Визначення інтенсивності джерела вихору в кутовій точці  
(В. К. Хрущ, М. М. Біляєв)

Інтенсивність джерела вихору в кутових точках визначається на базі методу, що запропоновано В. К. Хрущем, М. М. Біляєвим. Для опису цього методу розглянемо контрольний об'єм  $L=AODCBA$  (рис. 3.2). Далі, на базі теореми Стокса, записується така залежність:

$$v_1(y_c - y_b) - u_2(x_c - x_d) = G_0 + \frac{1}{4}(\omega_b \Delta S_b + \omega_c \Delta S_c + \omega_d \Delta S_d),$$

де  $G_0$  – значення вихору в кутовій точці;

$\omega_b, \omega_c, \omega_d$  – величина вихору в різницевих комірках;

$\Delta S_b, \Delta S_c, \Delta S_d$  – площі відповідних різницевих комірок.

Ця залежність дає можливість визначити інтенсивність вихору в точці відриву (рис. 3.1):

$$G_0 = v_1(y_c - y_b) - u_2(x_c - x_d) - \frac{1}{4}(\omega_b \Delta S_b + \omega_c \Delta S_c + \omega_d \Delta S_d).$$

Для визначення напрямку руху вихору використовується залежність:

$$u_0 = \frac{(u_2 + u_4)}{2} = \frac{u_2}{2}, v_0 = \frac{(v_1 + v_3)}{2} = \frac{v_1}{2}.$$

Внаслідок руху вихору має місце зміна значення вихору в сусідньому контрольному елементі (В. К. Хрущ, М. М. Біляєв):

$$\bar{\omega}_b = \omega_b + \frac{G_0}{\Delta x \Delta y} \text{ при } u_0 > 0, v_0 > 0;$$

$$\bar{\omega}_c = \omega_c + \frac{G_0}{\Delta x \Delta y} \text{ при } u_0 > 0, v_0 > 0;$$

$$\bar{\omega}_d = \omega_d + \frac{G_0}{\Delta x \Delta y} \text{ при } u_0 > 0, v_0 > 0.$$

Ці залежності використовуються для розрахунку величини вихору біля точки відриву в момент часу  $t=t^{n+1}$ .

Рівняння для функції току (рівняння Пуассона) записується в «нестационарному» вигляді:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \omega, \quad (3.4)$$

де  $\eta$  – фіктивний час.

Далі використовується схема сумарної апроксимації. Послідовність рішення така:

- перший крок:

$$\frac{\psi_{ij}^{n+1/4} - \psi_{ij}^n}{\Delta t} = \frac{\bar{\psi}_{ij}}{2};$$

- другий крок:

$$\frac{\psi_{i,j}^{n+1/2} - \psi_{i,j}^n}{\Delta t} = - \frac{\psi_{i,j}^{n+1/2} - \psi_{i-1,j}^{n+1/2}}{\Delta x^2} - \frac{\psi_{i,j}^{n+1/2} - \psi_{i,j-1}^{n+1/2}}{\Delta y^2};$$

- третій крок:

$$\frac{\psi_{i,j}^{n+3/4} - \psi_{ij}^{n+1/2}}{\Delta t} = \frac{\psi_{i+1,j}^{n+3/4} - \psi_{i,j}^{n+3/4}}{\Delta x^2} + \frac{\psi_{i,j+1}^{n+3/4} - \psi_{i,j}^{n+3/4}}{\Delta y^2};$$

- четвертий крок:

$$\frac{\psi_{ij}^{n+1} - \psi_{ij}^{n+3/4}}{\Delta t} = \overline{\omega_{i,j}},$$

$$\text{де } \overline{\omega_{i,j}} = \frac{1}{4}(\omega_{i,j} + \omega_{i-1,j+1} + \omega_{i-1,j-1} + \omega_{i,j-1}).$$

Гранична умова непротікання для вихору  $\omega$  реалізується шляхом використання в дискретній моделі фіктивних комірок.

На вихідній границі для даних функцій в дискретній моделі реалізується м'яка гранична умова. На вхідній границі задається значення вихору (наприклад  $\omega = 0$ ), а для функції току значення  $\psi|_0 = y \cdot u_\varepsilon$  ( $u_\varepsilon$  – швидкість втікання потоку).

Початкові умови мають вигляд  $\omega|_{t=0} = \omega_0(x, y)$ , де  $\omega_0$  – відоме значення вихору в розрахунковій області,  $\psi|_{t=0} = \psi_0(x, y)$ . У кутових точках, де допускається відрив потоку, розташовується джерело вихору. Інтенсивність джерела вихору визначається за методикою, що розглянута вище.

Чисельне рішення рівнянь гідродинаміки здійснюється в такій послідовності :

- визначається інтенсивність приєднаних вихорів в кутових точках і їх зміщення в сусідні комірки;
- розраховується перенесення вихору  $\omega$  в розрахунковій області;
- чисельно інтегрується рівняння Пуассона, визначається нове значення функції струму  $\psi$  і компонент швидкості водного потоку і стають відомими значення параметрів в момент часу  $t^{n+1}$ .

Розрахунок розглянутих рівнянь гідродинаміки припиняється при виконанні умови:

$$|\psi_{i,j}^{n+1} - \psi_{i,j}^n| \leq \varepsilon, \quad (3.5)$$

де  $\varepsilon$  – мале число;

$n$  – номер ітерації (кількість кроків по «часу»).

Значення компонент вектора швидкості течії розраховується так:

$$\begin{aligned} u_{i,j} &= \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{\Delta y}, \\ v_{i,j} &= -\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{\Delta x}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Розраховане поле швидкості служить основою для вирішення завдання масопереносу.

Розроблено комплекс комп'ютерних програм CHPSI, що реалізує рішення задачі гідродинаміки на базі побудованої чисельної моделі:

- *CQE1* – розрахунок рівняння переносу вихору (перше рівняння розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CQE2* – розрахунок рівняння переносу вихору (друге рівняння розщеплення, підпрограма типу SUBROUTINE);

- *CQ11* – реалізація граничних умов при розрахунку рівнянь для переносу вихору (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CQ22* – розрахунок значення функції току (перший крок, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CQ23* – розрахунок значення функції току (другий крок, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CQ5* – розрахунок значення функції току (третій крок, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CQ6* – розрахунок значення функції току (четвертий крок, підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CQ4* – реалізація граничних умов при розрахунку функції току (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CQ7* – розрахунок поля швидкості потоку в аеротенку (підпрограма типу SUBROUTINE);
- *CPI* – презентація результатів комп'ютерного моделювання.

Час розрахунку на базі даної чисельної моделі 7 с.

Для організації комп'ютерного експерименту потрібні такі дані:

- геометрична форма аеротенку;
- розміри аеротенку;
- швидкість потоку стічних вод на вході в аеротенк;
- місце виходу потоку з аеротенку;
- місце входу потоку в аеротенк;
- крок за часом;
- кількість ітерацій;
- розмір різницевої сітки.

Результат «роботи» даної чисельної моделі та комп'ютерної програми, що її реалізує – поле швидкості потоку в аеротенку, що далі використовується для рішення задачі масопереносу.

На другому етапі здійснюється рішення рівняння, спряженого з рівнянням масопереносу, а саме;

$$-\frac{\partial C^*}{\partial t} - \frac{\partial uC^*}{\partial x} - \frac{\partial vC^*}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial C^*}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial C^*}{\partial y} \right) + p, \quad (3.7)$$

де  $C^*$  – функція, спряжена з  $C$ ;  $C$  – концентрація розчиненого кисню в стічній воді),  $p$  – функція, що визначається так (Г. Марчук);

$$p(x, y, t) = \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \delta(t - \tau),$$

де  $t$  – час,  $(x_i, y_i)$  – координати точки «інтересу».

Далі, згідно Г. Марчуку, вводяться нові змінні:

$$u' = -u, v' = -v, t' = T - t.$$

Тоді спряжене рівняння можна записати так;

$$\frac{\partial C^*}{\partial t'} + \frac{\partial u'C^*}{\partial x} + \frac{\partial v'C^*}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial C^*}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial C^*}{\partial y} \right) + p, \quad (3.8)$$

Позначка «\*» показує, що це є функція в рівнянні, де використані нові змінні.

З (3.8) можна бачити, що спряжене рівняння в нових змінних повністю співпадає з «класичним» рівнянням масопереносу розчиненого кисню. Особливістю його рішення є те, що розрахунок починається в момент часу  $T$  та йде в бік зменшення часу  $t$ . Для чисельного інтегрування рівняння (3.8) використовується чисельна модель та комплекс програм, що розроблені для визначення концентрації повітряних бульбашок в аераторі.

Таким чином, для рішення задачі по визначенню раціонального місця розташування аератору використовуються програмні комплекси *CHPSI* та

*CHBU*, структура яких розглянута вище.

Алгоритм рішення задачі наступний:

1. Здійснюється введення початкових даних (на момент часу  $t=0$ ) в основну комп'ютерну програму MAIN.Prg.

2. Здійснюється рішення чисельної моделі гідродинаміки.

3. Визначається поле швидкості потоку в аеротенку.

4. Здійснюється рішення рівняння (3.8).

5. «Будується» поле функціонала (2.23)

6. Здійснюється друк результатів комп'ютерного моделювання для візуального аналізу місця можливого розташування аератора.

Витрати комп'ютерного часу на рішення цієї задачі складають 2 с.

### 3.6 Верифікація чисельних моделей

Для верифікації розроблених чисельних моделей було вирішено комплекс тестових задач.

Розглядається течія в прямокутному лотку (рис.3.3). Гідродинаміка течії була експериментально вивчена в роботі Shahrokhi et al. Рух рідини має місце в лотку, що має розміри : 200 см×50 см× 30 см (витрата:  $Q=2$  л/с).

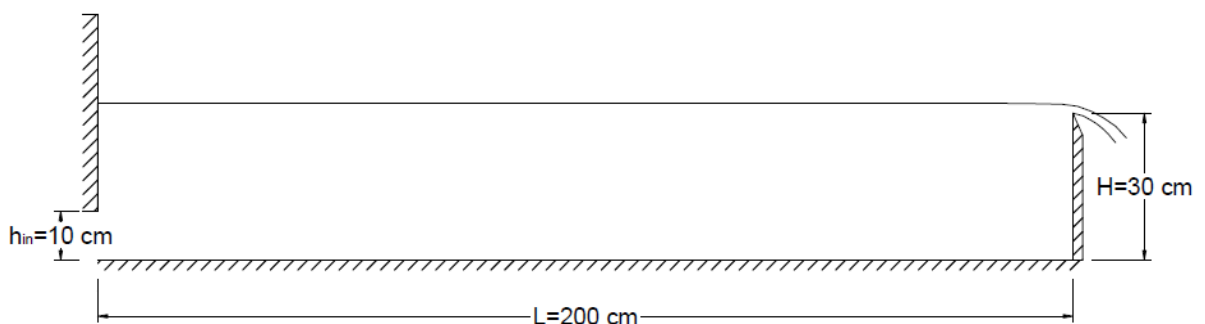


Рисунок 3.3 – Схема лотка (Shahrokhi et al)

Результати моделювання гідродинаміки течії показані в табл. 3.1.

Таблиця 3.1 – Значення швидкості потоку

х, см	10	46
Експеримент (М. Shahrokhi et al)	4.20 см/с	4.00 см/с
Розрахунок (М. Shahrokhi)	4.00 см/с	4.00 см/с
Розрахунок (М. Лемеш)	3.66 см/с	3.62 см/с
Розрахунок (В. Козачина)	3.47 см/с	3.32 см/с
Розроблена модель (потенціальна течія / рівняння Ейлера)	3.68 / 3.63	3.64 / 3.58

Як можна бачити з наведеної таблиці, має місце задовільне узгодження між даними вимірювань та розрахунками інших авторів.

Далі було проведено моделювання процесу втікання струменя в плоску прямокутну камеру розміром 108см×150см (рис. 3.4). Експериментальні дані та результати математичного моделювання на базі рівнянь Нав'є-Стокса (Г. В. Калабін, А. А. Бакланов, П. В. Амосов.) та розрахунок на базі моделі нев'язкої безвихрової течії (В. Козачина) наведені нижче в табл. 3.2, в якій також наведені результати розрахунку на базі розроблених чисельних моделей нев'язкої рідини. Параметри розрахунку: ширина вхідного і вихідного отворів 4 см, швидкість на вході – 60 см/с.

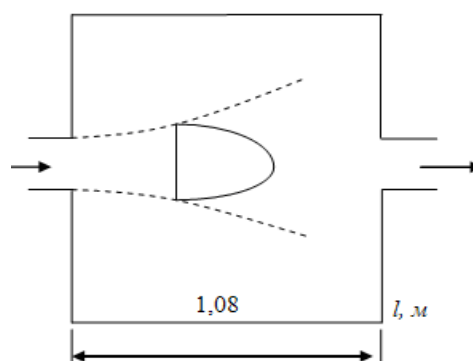


Рисунок 3.4 – Схема розрахункової області

Таблиця 3.2 – Значення осьової швидкості, м/с

Метод розрахунку	Відстань від входу, м		
	0	0,2	0,4
Розрахунок (В. Козачина)	0,6	0,49	0,44
Експеримент (Г. В. Калабін, А. А. Бакланов, П. В. Амосов)	0,6	0,47	0,40
Розрахунок (Г. В. Калабін, А. А. Бакланов, П. В. Амосов)	0,6	0,46	0,41
Розрахунок (модель потенціального руху/ рівняння Ейлера)	0.62/0.61	0.49/0.48	0.53/0.51

Як можна бачити з наведеної таблиці, має місце задовільне узгодження з експериментом та даними інших дослідників.

Розглянемо результати верифікації чисельної моделі гідродинаміки, що розроблена для чисельного інтегрування тривимірного рівняння (3.3). Верифікація була здійснена шляхом порівняння результатів розрахунку тестової задачі, що має аналітичне рішення (А. Д. Полянін): область  $0 \leq x < \infty$ ,  $0 \leq y < \infty$ ,  $0 \leq z < \infty$ ; на границях  $x=0$ ,  $y=0$ ,  $z=0$ :  $T=0$  °С; початкова умова  $T=T_0$  ( $T_0=300$  °С); розміри області при проведенні чисельного експерименту:  $12\text{м} \times 12\text{м} \times 12\text{м}$ ; коефіцієнт теплопровідності  $a=1$ ; визначення температури здійснюється в точці:  $x=1$  м,  $y=1$  м,  $z=1$  м. Моделююче рівняння має вигляд:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right).$$

Аналітичне рівняння має вигляд (А. Д. Полянін):

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

Дані розрахунку показані в таблиці. В таблиці також наведені результати чисельного моделювання, що були здійснені Оладіпо Мутіо Олатойє.

Таблиця 3.3 – Динаміка зміни температури

$T, \text{ c}$	Аналітичний розв'язок	Чисельне рішення (Оладіпо М. О./побудована модель)
2	15,19 °C	15,24°C/15,28 °C
4	5,90 °C	6,01 °C/6,11 °C
6	3,28 °C	3,33°C/3.37 °C

Таким чином, результати проведеного обчислювального експерименту підтверджують адекватність розробленої моделі.

Далі, для тестування двовимірних моделей масопереносу була вирішена наступна задача: в прямокутній області є точкове джерело забруднення, інтенсивність емісії 1 г/с (висота усереднення 1 м), рис. 3.5; координати джерела  $x=2.5$  м,  $y=12.5$  м; розміри розрахункової області 25 м×25 м; значення коефіцієнтів дифузії по кожному напрямку 1.5 м<sup>2</sup>/с; швидкість потоку 3 м/с. Розрахунок здійснюється на сітках 25×25 контрольних елементів та 50×50 контрольних елементів.

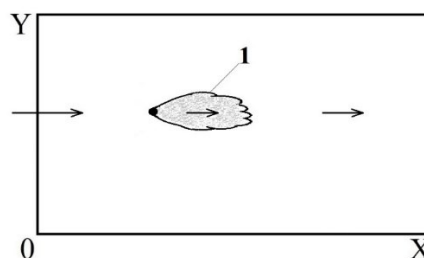


Рисунок 3.5 – Схема розрахункової області

Результати обчислювального експерименту (значення концентрації домішки на різній відстані від джерела емісії) показані далі в таблицях.

Таблиця 3.4 – Значення концентрації домішки на різній відстані від джерела (сітка 25×25 контрольних елементів)

х, м	1	2	3	4	5	6
Модель №1	0.070 г/м <sup>3</sup>	0.053 г/м <sup>3</sup>	0.043 г/м <sup>3</sup>	0.037 г/м <sup>3</sup>	0.034 г/м <sup>3</sup>	0.031 г/м <sup>3</sup>
Модель №2	0.072 г/м <sup>3</sup>	0.054 г/м <sup>3</sup>	0.044 г/м <sup>3</sup>	0.038 г/м <sup>3</sup>	0.036 г/м <sup>3</sup>	0.033 г/м <sup>3</sup>
Модель №3	0.072 г/м <sup>3</sup>	0.053 г/м <sup>3</sup>	0.044 г/м <sup>3</sup>	0.037 г/м <sup>3</sup>	0.035 г/м <sup>3</sup>	0.032 г/м <sup>3</sup>
Модель №4	0.071	0.055	0.044	0.038	0.035	0.030

Таблиця 3.5 – Значення концентрації домішки на різній відстані від джерела (сітка 50×50 контрольних елементів)

х, м	1	2	3	4	5	6
Модель №1	0.068 г/м <sup>3</sup>	0.051 г/м <sup>3</sup>	0.041 г/м <sup>3</sup>	0.035 г/м <sup>3</sup>	0.032 г/м <sup>3</sup>	0.029 г/м <sup>3</sup>
Модель №2	0.067 г/м <sup>3</sup>	0.052 г/м <sup>3</sup>	0.042 г/м <sup>3</sup>	0.034 г/м <sup>3</sup>	0.032 г/м <sup>3</sup>	0.029 г/м <sup>3</sup>
Модель №3	0.067 г/м <sup>3</sup>	0.051 г/м <sup>3</sup>	0.041 г/м <sup>3</sup>	0.035 г/м <sup>3</sup>	0.031 г/м <sup>3</sup>	0.030 г/м <sup>3</sup>
Модель №4	0.068	0.052	0.041	0.034	0.033	0.031

Аналіз даних, що наведені в таблицях, дає можливість зробити висновок про адекватність розроблених чисельних моделей.

Для верифікації двовимірної чисельної моделі гідродинаміки були використані експериментальні дані, що отримані В. Козачиною та наведені в його дисертації: розглядався рух води в гідравлічному лотку, де

розташовувалися водозливи та була додаткова пластина (рис. 3.6 та рис. 3.7). Розміри лотка: 150 см×13 см×14 см. Швидкість потоку в різних точках вимірювалась трубкою Піто на відстані 5 см від вертикальної пластини у відстійнику. Виміри здійснювалися в точка к1, к2, к3 на різній висоті від дна лотка (рис. 3.6).

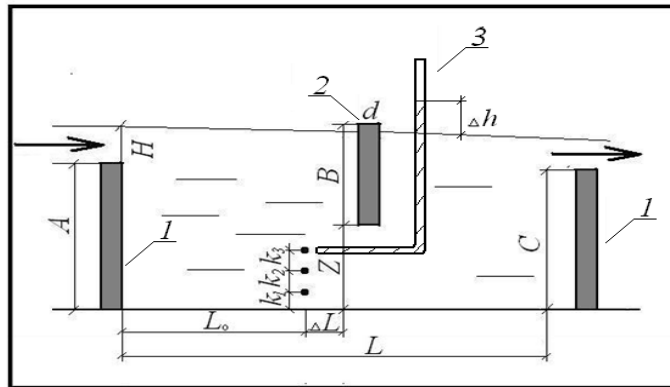


Рисунок 3.6 – Точки виміру швидкості потоку: 1 – водозлив; 2 – вертикальна пластина; 3 – трубка Піто (за матеріалами В. Козачини)

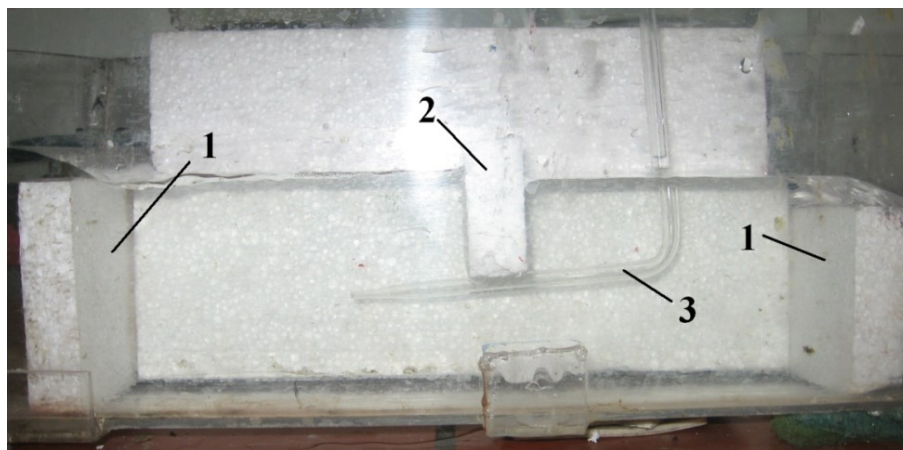


Рисунок 3.7 – Гідравлічний лоток: 1 – пластина; 2 – вертикальна перегородка; 3 – трубка Піто (за матеріалами В. Козачини)

Середнє значення витрати води 243 см<sup>3</sup>/с.

Далі в таблиці наведені експериментальні та розрахункові дані щодо значення локальної швидкості води.

Таблиця 3.6 – Значення локальної швидкості потоку

Висота від дна	Експеримент, м/с (В. Козачина )	Розрахунок, м/с
2 см	0,37	0,42
3 см	0,39	0,44
4 см	0,42	0,48

Дані, що наведені в табл. 3.7, дають можливість казати про задовільне узгодження результатів комп'ютерного моделювання та експерименту.

### Висновки до розділу 3

1. Розглянуто побудову двовимірних чисельних моделей для визначення в аеротенку концентраційних полів активного мулу, субстрату, розчиненого кисню, повітряних бульбашок, що виходять з аератору; моделі враховують конвективний перенос в аеротенку, процес дифузії, тобто основні гідродинамічні параметри, що впливають на формування концентраційних полів аеротенку.

2. Розглянуто побудову тривимірних чисельних моделей для визначення в аеротенку концентраційних полів активного мулу, субстрату, розчиненого кисню, повітряних бульбашок, що виходять з аератору; моделі враховують конвективний перенос в аеротенку, процес дифузії, тобто основні гідродинамічні параметри, що впливають на формування просторових концентраційних полів аеротенку.

3. Розглянуто побудову тривимірної чисельної моделі для рішення задачі гідродинаміки в аеротенку; розрахунок значення потенціалу швидкості здійснюється на базі явної формули, що допускає просту програмну реалізацію чисельної моделі.

4. Розглянуто побудова двох двовимірних чисельних моделі для рішення задачі гідродинаміки в аеротенку; перша модель базується на

чисельному інтегруванні рівняння для потенціалу швидкості, друга – шляхом чисельного інтегруванні рівнянь Ейлера. Особливістю обох чисельних моделей є використання явних формул для визначення невідомих параметрів. Це дає можливість здійснити просту програмну реалізацію розроблених чисельних моделей гідродинаміки.

5. Розглянуто побудову чисельної моделі для рішення багатофакторної задачі по визначенню місця раціонального розташування аератору в аеротенку.

6. Здійснено програмну реалізацію розроблених чисельних моделей. Створені коди являють собою інструмент визначення значення потенціалу швидкості на базі явної формули, що допускає просту програмну реалізацію чисельної моделі.

7. Здійснено верифікацію розроблених чисельних моделей; результати верифікації підтвердили адекватність розроблених моделей.

## **РОЗДІЛ 4 МОДЕЛЮВАННЯ ГІДРОДИНАМІКИ ТА МАСОПЕРЕНОСУ В АЕРОТЕНКАХ, ЩО МАЮТЬ СКЛАДНУ КОНФІГУРАЦІЮ**

В розділі розглянуте використання розроблених чисельних моделей та створених на їх базі комп'ютерних кодів для аналізу процесів масопереносу в аеротенках.

### **4.1 Моделювання процесу поширення пилу в аеротенку від аератору**

Відомо, що при подачі повітря в аеротенк в споруду можуть потрапляти домішки, що негативно впливають на активний мул. Ці домішки потрапляють в компресори, так як попередня очистка повітря практично відсутня на станціях аерації. Нижче наведені результати обчислювального експерименту по аналізу формування областей техногенного забруднення водного середовища при потраплянні пилу від аератору. Мета обчислювального експерименту – показати можливість розробленої чисельної моделі проводити розрахунки для аеротенку, що має складну конфігурацію та різні ділянки, де має місце емісія пилу. Рішення задачі гідродинаміки здійснюється на базі моделі потенціального руху.

Розглядалися наступні сценарії:

1. Сценарій № 1 – в аеротенку знаходяться три аератори, що розташовані біля дна на одному рівні (рис. 4.1).
2. Сценарій № 2 – в аеротенку знаходяться три аератори, один з них розташований на певній висоті (це «підставка», що впливає на гідродинаміку) (рис. 4.2).
3. Сценарій № 3 – в аеротенку знаходяться три аератори, що розташовані біля дна на одному рівні, але біля аераторів розташовані екрани (це перешкоди, що впливають на гідродинаміку) (рис. 4.3).

Відзначимо деталі, що суттєво ускладнюють теоретичне рішення задачі:

1. Розрахунок гідродинаміки при врахуванні впливу на потік стічних вод екрану.

2. Різне місце розташування аераторів.

Розрахунок здійснено при таких параметрах:

- розміри розрахункової області: 12м × 5м (осереднення здійснюється по ширині аеротенку 5 м);

- швидкість потоку стічних вод на вході в аеротенк 0.005 м/с;

- інтенсивність емісії пилу від аератору: 10 мг/с;

- крок за часом: 0.5 с;

- кількість ітерацій: 700;

- розмір різницевої сітки: 25×21 контрольних елементів.

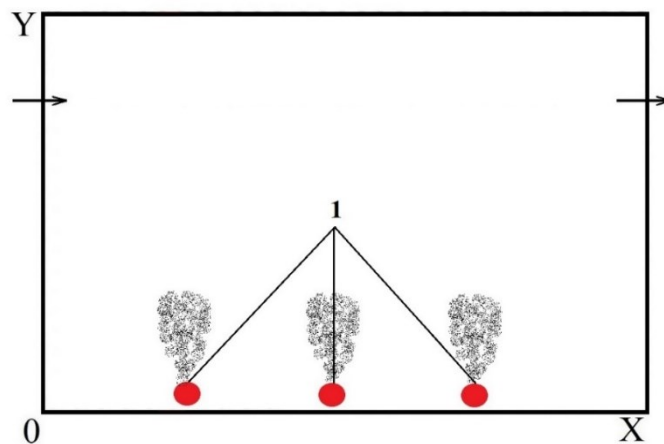


Рисунок 4.1 – Схема розрахункової області, сценарій № 1: 1 – аератор

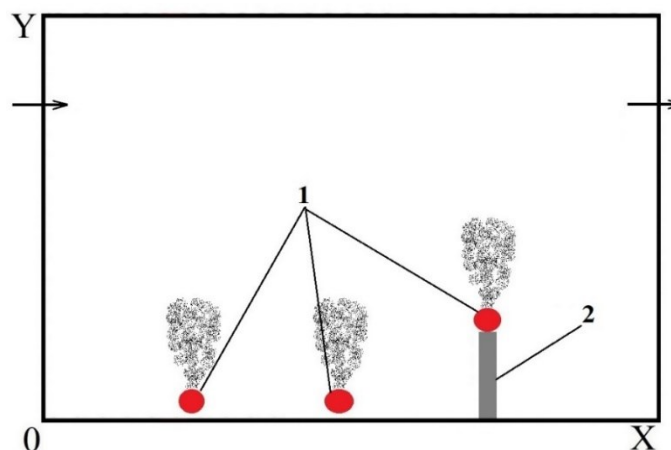


Рисунок 4.2 – Схема розрахункової області, сценарій № 2: 1 – аератори на дні аеротенку; 2 – аератор на підставці

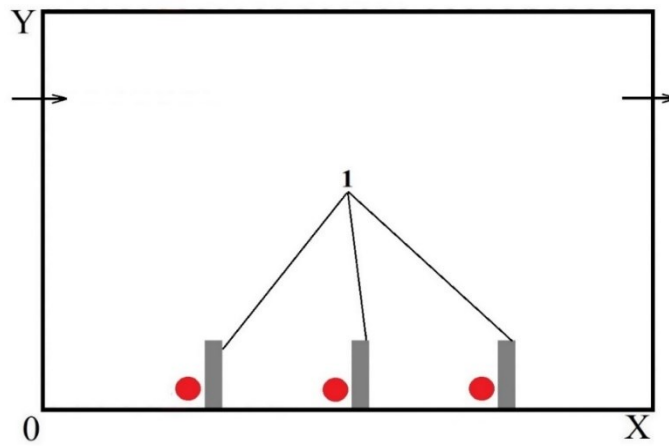


Рисунок 4.3 – Схема розрахункової області, сценарій № 3: 1 – екрани біля аераторів

Рішення задачі здійснюється шляхом встановлення рішення за часом. Нижче на рисунках показані результати обчислювального експерименту. Результати показані у вигляді матриці концентрації пилу в аеротенку. Для друку результатів обчислювального експерименту використовувався формат «INTEGER» (FORTRAN code). Такий формат передбачає виведення чисел без дробової частини. Використання такого формату друку дає можливість швидко аналізувати поле концентрації та визначати зони різної інтенсивності забруднення. Кожне число на матриці показує у відсотках концентрацію пилу від  $C_{max}$  максимального її значення в розрахунковій області. Друк результатів моделювання у вигляді відсотків використовується на практиці для швидкого аналізу результатів дослідження (J. Voog, T. Kalbacher, J. Nivala, M. Біляєв), крім цього, та така «презентація» результатів дає комплексну оцінку процесу, що моделюється, – а саме, значення концентрації шуканого параметру в будь-якій точці споруди.

На приведених рисунках (червоне «коло») показує місце емісії пилу в аеротенк (положення дифузора). Числу «99» відповідає максимальному значенню концентрації пилу, тобто – це  $C_{max}$ . Також слід відзначити, що там, де друкується число «0», концентрація менша, ніж 1 %.



Рисунок 4.4 – Поле концентрації пилу, сценарій № 1,  $C_{max}=82.40$  мг/м<sup>3</sup>



Рисунок 4.5 – Поле концентрації пилу, сценарій № 2,  $C_{max}=82.40$  мг/м<sup>3</sup>

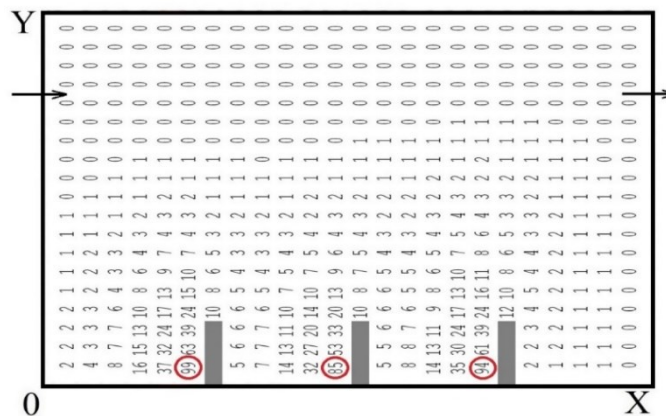


Рисунок 4.6 – Поле концентрації пилу, сценарій № 3,  $C_{max}=82.40$  мг/м<sup>3</sup>

Аналіз даних комп'ютерного експерименту, що наведені на рис. 4.3-4.6, дає можливість зробити такі висновки. Для першого сценарію висота області, де має місце інтенсивне забруднення середовища в аеротенку (концентрація

пилу від 12 % до 99 %), дорівнює порядку 1.4 м. Для другого сценарію висота області, де має місце інтенсивне забруднення середовища в аеротенку, дорівнює порядку 2 м. Це пов'язано з тим, що третій аератор розташовано на висоті 0.9 м від дна аеротенку. Для третього сценарію – можна бачити, що область забруднення середовища в аеротенку зменшилася, висота – порядку 1.2 м та можна бачити локалізацію цієї області забруднення біля захисних екранів; в іншій частині аеротенку концентрація домішки знаходиться в межах 1-5% від  $C_{max}$ . Слід зазначити, що використання захисних екранів має ще таку позитивну функцію – на екранах будуть формуватися колонії мікроорганізмів, що будуть задіяні додатково в процесі очистки стічних вод.

#### **4.2 Моделювання процесу поширення повітряних бульбашок в аеротенку**

Нижче наведені результати обчислювального експерименту по аналізу формування областей розповсюдження повітряних бульбашок в аеротенку від аераторів. Мета обчислювального експерименту – показати можливість розробленої чисельної моделі проводити розрахунки для аеротенку, що має складну конфігурацію та різні ділянки, де має місце емісія повітряних бульбашок. Значення концентрації повітряних бульбашок всередині аеротенку є особливо важливою інформацією, так як дає можливість виявити області, де може бути низька концентрація повітря. Рішення задачі гідродинаміки здійснюється на базі моделі потенціального руху.

Розглядалися наступні сценарії:

1. Сценарій № 1 – в аеротенку знаходяться чотири аератори (вони розташовані на «підставках», що впливають на гідродинаміку), що розташовані біля дна на одному рівні (рис. 4.7).
2. Сценарій № 2 – в аеротенку знаходяться чотири аератори на дні та один додатковий, розташований на певній висоті (враховується вплив

підставок на дні аеротенку та вертикального екрану у верхній частині аеротенку на гідродинаміку) (рис. 4.8).

3. Сценарій № 3 – в аеротенку знаходяться чотири аератори на дні та один додатковий – у верхній частині (враховується вплив підставок на дні аеротенку та вертикального екрану складної форми у верхній частині аеротенку на гідродинаміку) (рис. 4.9).

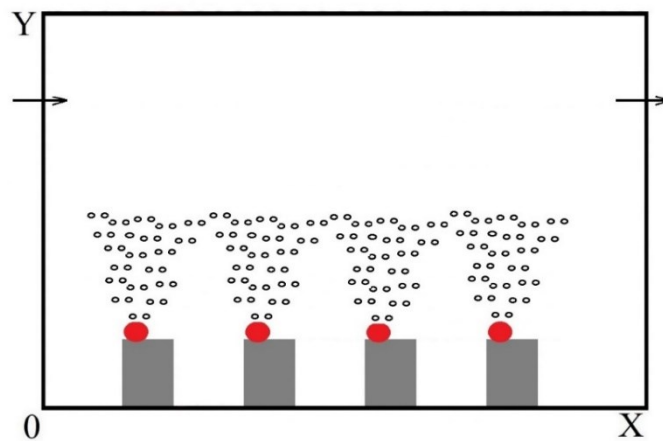


Рисунок 4.7 – Схема розрахункової області, сценарій № 1

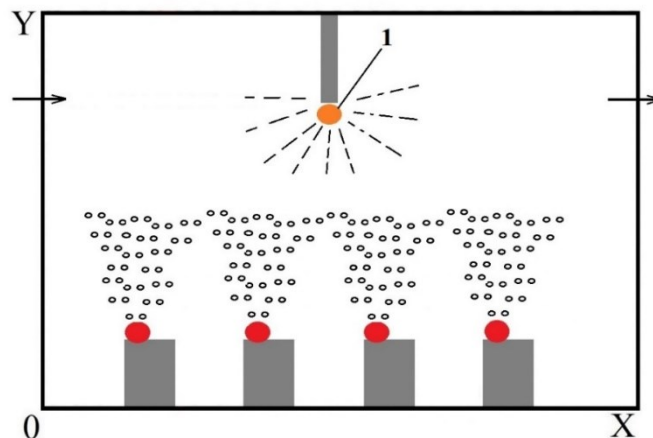


Рисунок 4.8 – Схема розрахункової області, сценарій № 2: 1 – додатковий аератор в верхній частині аеротенку

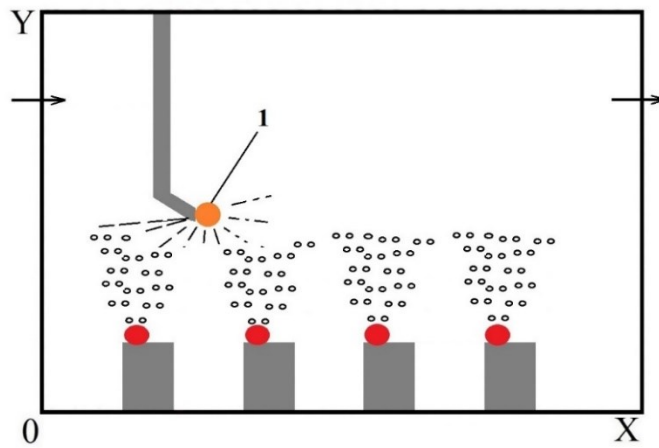


Рисунок 4.9 – Схема розрахункової області, сценарій № 3: 1 – додатковий аератор в верхній частині аеротенку

Відзначимо деталі, що суттєво ускладнюють теоретичне рішення задачі:

1. Розрахунок гідродинаміки при врахуванні впливу на потік підставок для дифузорів, екрану.

2. Різне місце розташування аераторів.

3. Рух повітряних бульбашок в очисній споруді.

Розрахунок здійснено при таких параметрах:

- розміри розрахункової області: 12м× 5м (осереднення здійснюється по ширині аеротенку 5 м);

- швидкість потоку стічних вод на вході в аеротенк 0.005 м/с;

- інтенсивність емісії повітряних бульбашок від аератору:  $10^6$  часток/с;

- швидкість вертикального руху повітряних бульбашок 15 см/с;

- крок за часом: 0.7 с;

- кількість ітерацій: 600;

- розмір різницевої сітки :  $25 \times 21$  контрольних елементів.

Рішення задачі здійснюється шляхом встановлення рішення за часом.

Нижче на рисунках показані результати обчислювального експерименту.

Результати показані у вигляді матриці концентрації повітряних бульбашок в аеротенку.

Для друку результатів обчислювального експерименту використовувався формат «INTEGER», тобто, має місце виведення чисел без дробової частини. Кожне число на матриці показує у відсотках концентрацію





Рисунок 4.12 Поле концентрації повітряних бульбашок, сценарій № 3,

$$C_{\max} = 0.90 \cdot 10^7 \text{ часток/м}^3$$

Аналіз даних комп'ютерного експерименту, що наведені на рис. 4.10-4.12, дає можливість визначити таку закономірність: конфігурація споруди та місце розташування аератору має суттєвий вплив на формування концентраційного поля повітряних бульбашок в аеротенку. Максимальна концентрація повітряних бульбашок має місце біля аераторів, тобто, джерела емісії бульбашок. Для першого сценарію, в верхній половині аеротенку концентрація повітряних бульбашок – мала. Область концентрації бульбашок повітря, яка більша ніж 7 %, формується в нижній половині аеротенку. В верхній частині аеротенку концентрація повітряних бульбашок досягає значення 1-5% від максимальної концентрації.

Дані обчислювального експерименту, що наведені на рис.4.11, рис.4.12 яскраво показують, що положення аератору в верхній частині аеротенку суттєво впливає на форму поля концентрації повітряних бульбашок. Так, для другого сценарію (рис. 4.11) – це поле практично є симетричним, але для третього сценарію – поле концентрації бульбашок є суттєво асиметричним. В обох цих сценаріях максимальна концентрація повітряних бульбашок формується як біля дифузорів, що розташовані на дні споруди, так і біля аератору, що розташований в нижній частині аеротенку.

Відзначимо, час розрахунку одного варіанту 3 с.

### 4.3 Моделювання кисневого режиму в аеротенках на базі двовимірних CFD моделей

Моделювання кисневого режиму в аеротенку здійснюється на базі CFD (чисельних) моделей, що розроблені в Розділі 3 роботи. Досліджуваний процес базується на використанні системи рівнянь масопереносу та гідродинаміки, що розглянуті в Розділі 2. Аналіз кисневого режиму базується на сумісному рішенні рівнянь масопереносу активного мулу, субстрату, повітря та розчиненого кисню в аеротенку (Розділ 2). З математичної точки зору, ці рівняння масопереносу є лінійними, але рівняння Monod, що пов'язують такі параметри, як концентрація активного мулу, концентрація субстрату, концентрація розчиненого кисню, – робить систему моделюючих рівнянь нелінійною. Тобто, на концентрацію розчиненого кисню в кожній точці аеротенку впливає концентрація в цій точці активного мулу, субстрату, повітря та значення концентрації розчиненого кисню на даному часовому кроці. Це суттєво ускладнює теоретичне рішення задачі про прогнозування кисневого режиму в аеротенку.

Розрахунок концентрацій здійснюється в такій послідовності:

1. Рішення 2D задачі гідродинаміки та визначення поля швидкості потоку в аеротенку.
2. Розрахунок локальних значень коефіцієнтів дифузії.
3. Рішення рівняння масопереносу субстрату в аеротенку.
4. Рішення рівняння масопереносу активного мулу в аеротенку.
5. Рішення рівняння масопереносу повітря в аеротенку.
6. Рішення рівняння масопереносу розчиненого кисню в аеротенку.
7. Рішення рівняння масопереносу кисню від повітря до розчиненого кисню в кожному контрольному елементі (різницькій комірці).
8. Рішення рівнянь Monod.

Відзначимо деталі, що суттєво ускладнюють теоретичне рішення задачі:

1. Розрахунок гідродинаміки при врахуванні впливу на потік струменя повітря, екрану.

2. Рух повітряних бульбашок в очисній споруді.

Розглядаються декілька сценаріїв. Сценарій № 1: використання аератора Maguire (jet aerator) для подачі повітря в аеротенк. Розрахункова схема показана на рис. 4.13.

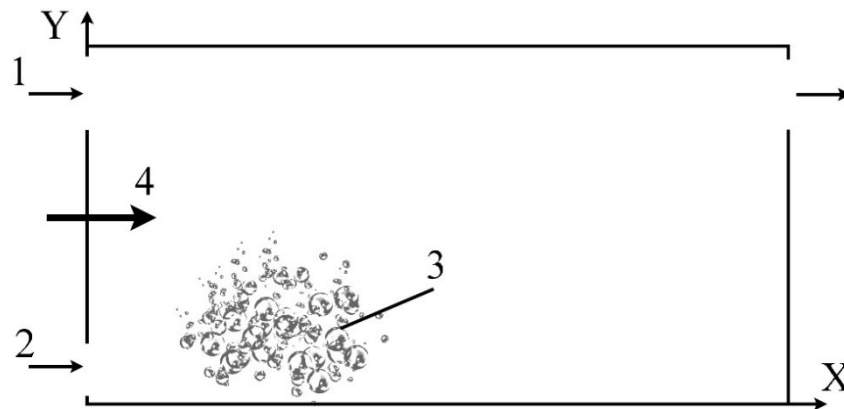


Рисунок 4.13 – Схема розрахункової області (Сценарій № 1): 1 – місце подачі субстрату; 2 – місце подачі повітря; 3 – бульбашки повітря; 4 – місце подачі активного мулу

Обчислювальний експеримент проводився при таких параметрах (Розділ 2):

$$K_d = 0.055 \text{ 1/доб};$$

$S_{in} = 130 \text{ мг/л}$  – концентрація субстрату (БПК<sub>пов</sub>), що потрапляє в аеротенк;

$$X_{in} = 2 \text{ г/л} – \text{концентрація активного мулу, що потрапляє в аеротенк};$$

$$\mu_{\max} = 1.04;$$

$$K_s = 100 \text{ мг/л};$$

$$Y = 0.55;$$

$$DO_{\max} = 9.1 \text{ мг/л};$$

$$\mu_{\max} = 1.04;$$

$$K_{DO}=0.05;$$

$$K_{La}=4 \text{ (1/год);}$$

інтенсивність подачі повітря 3.6 м<sup>3</sup>/с; швидкість вертикального руху повітря 12 см/с; швидкість повітряного струменя 5 м/с; швидкість потоку стічних вод на вході в аеротенк 0.0004 м/с; швидкість потоку активного мулу на вході в аеротенк 0.0004 м/с розміри розрахункової області 10м×5м.

Розрахунок здійснюється при нульових початкових даних. Коефіцієнти дифузії розраховуються так:

$$\mu_x(x, y) = 0,1 \cdot u(i, j), \mu_y(x, y) = 0,1 \cdot v(i, j) \quad (4.1)$$

Тобто, коефіцієнти дифузії залежать від локального значення швидкості потоку в аеротенку. Ця швидкість визначається шляхом рішення задачі гідродинаміки.

Слід зазначити, що для демонстрації робочого діапазону розроблених чисельних моделей в розглянутому сценарії подача активного мулу в аеротенк здійснюється на окремій ділянці (рис. 4.13). Розглянутий сценарій має такі особливості, що суттєво ускладнюють теоретичне рішення задачі:

1. Різні місця подачі субстрату та активного мулу в аеротенк.
2. Вплив декількох потоків на гідродинаміку течії в споруді: рух повітряного струменя (позиція № 2, рис. 4.13), рух потоку стічних вод, що містять субстрат (позиція № 1, рис. 4.13), рух активного мулу (позиція № 4, рис. 4.13).

Таким чином, всередині аеротенку має місце взаємодія декількох потоків.

Нижче на рисунках показано поле концентрації активного мулу, субстрату та розчиненого кисню в аеротенку для моменту часу  $t=3.9$  год. Кожне число показує значення концентрації у відсотках від максимального значення  $C_{\max}$ . Друк чисел здійснено в форматі INTEGER, тобто, друкується лише ціла частина числа. Число «99» відповідає максимальна концентрація.



Як можна бачити з наведених рисунків, для вказаного моменту часу концентрація субстрату на виході з аеротенку дорівнює 29% від концентрації субстрату, що потрапляє в аеротенк (в даному випадку  $C_{\max}=140$  мг/л). Концентрація активного мулу на виході з аеротенку дорівнює 38% від концентрації субстрату, що потрапляє в аеротенк (в даному випадку  $C_{\max}=2$  г/л.). Знання цього параметру дуже важливо для оцінювання ефективності очищення стічних вод на наступному етапі очистки – у вторинних відстійниках. Значення концентрації розчиненого кисню на виході з аеротенку дорівнює 38 % від максимального значення концентрації  $C_{\max}$ , тобто дорівнює 3.4 мг/л. Максимальне значення концентрації розчиненого кисню спостерігається біля отвору повітряного струменю та знаходиться в діапазоні 72-88 % від максимальної концентрації.

Відзначимо, що час розрахунку складає 3 с.

Сценарій № 2: використання аератора Maguire (jet aerator) для подачі повітря в аеротенк та при наявності екрану в очисній споруді. Розрахункова схема показана на рис. 4.17. Параметри для розрахунку такі ж, що й для Сценарію № 1. Висота екрану 1.4 м, екран розташовано на відстані 2.8 м від отвору, де «виходить» повітря.

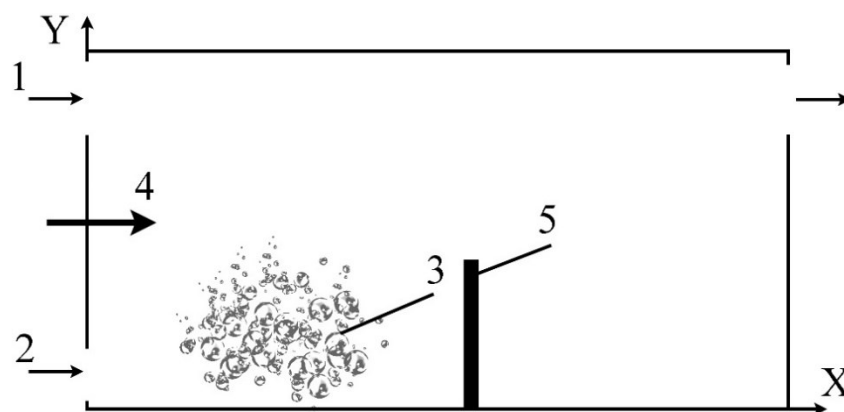


Рисунок 4.17 – Схема розрахункової області (Сценарій № 2): 1 – місце подачі субстрату; 2 – місце подачі повітря; 3 – бульбашки повітря; 4 – місце подачі активного мулу; 5 – екран



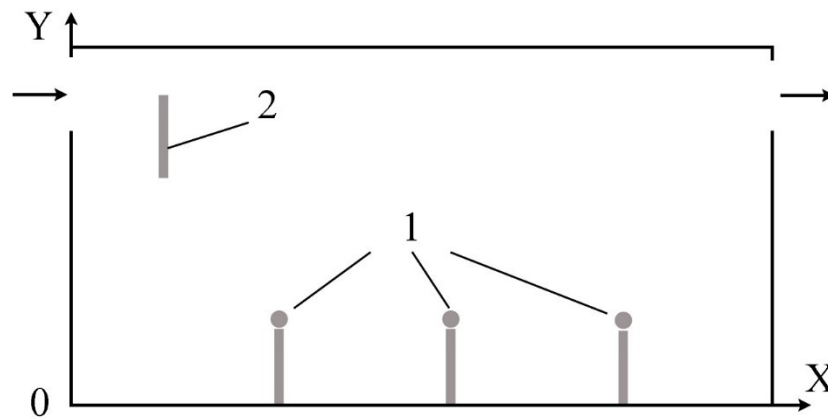


Рисунок 4.19 – Схема розрахункової області (Сценарій № 3, варіант 1):

1 – аератори; 2 – екран

Мета проведення обчислювального експерименту – перевірка розроблених CFD моделей на стійкість, тобто доказ працездатності (robust) розроблених CFD моделей при розрахунках в областях, що мають складну геометрію та при наявності багатозв'язної конфігурації течії. Як відомо, значна кількість чисельних моделей втрачають стійкість при проведенні розрахунків в таких областях.

Відзначимо деталі, що суттєво ускладнюють теоретичне рішення задачі, що розглядається:

1. Розрахунок гідродинаміки при врахуванні впливу на потік комплексу екранів та підставок для дифузорів.
2. Рух повітряних бульбашок в очисній споруді.
3. Багатозв'язність розрахункової області.

Обчислювальний експеримент проводився при таких параметрах :

$$K_d = 0.055 \text{ 1/доб};$$

$S_{in} = 130 \text{ мг/л}$  – концентрація субстрату (БПК<sub>пов</sub>), що потрапляє в аеротенк;

$$X_{in} = 2 \text{ г/л}$$
 – концентрація активного мулу, що потрапляє в аеротенк;

$$\mu_{\max} = 1.04;$$

$$K_s = 100 \text{ мг/л};$$

$$Y = 0.55;$$

$$K_{DO} = 0.05;$$

$$DO_{\max} = 9.1 \text{ мг/л};$$

$$\mu_{\max} = 1.04;$$

$$K_{La} = 9 \text{ (1/год)};$$

інтенсивність подачі повітря 0.02 кг/с; швидкості підйому повітря 13 см/с; швидкість потоку стічних вод на вході в аеротенк 0.0003 м/с; розміри розрахункової області 12.5 м × 5.8 м.

Для моменту часу  $t=0$  ставляться нульові початкові дані.

Далі на рисунках показані результати обчислювального експерименту для різних варіантів задачі (кількість та положення екранів в аеротенку). Значення параметрів приведено для моменту часу  $t=2.85$  год. Кожне число показує значення концентрації у відсотках від максимального значення  $C_{\max}$ . Друк чисел здійснено в форматі INTEGER, тобто, друкується лише ціла частина числа. Числу «99» відповідає максимальна концентрація.

На рис. 4.20-4.22 показані концентрації субстрату, активного мулу та розчиненого кисню при довжині вертикального екрану 1.35 м; висота підставок для дифузорів 1.08 м, відстань між підставками 2.5 м (Варіант 1).

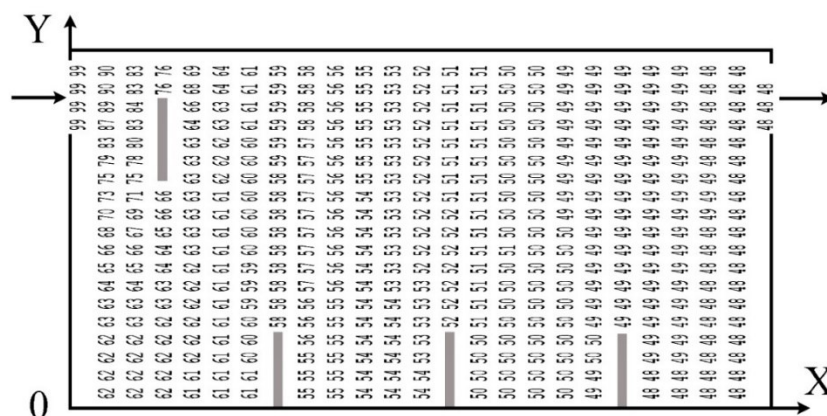


Рисунок 4.20 – Поле концентрації субстрату (Варіант 1,  $C_{\max} = 130$  мг/л)

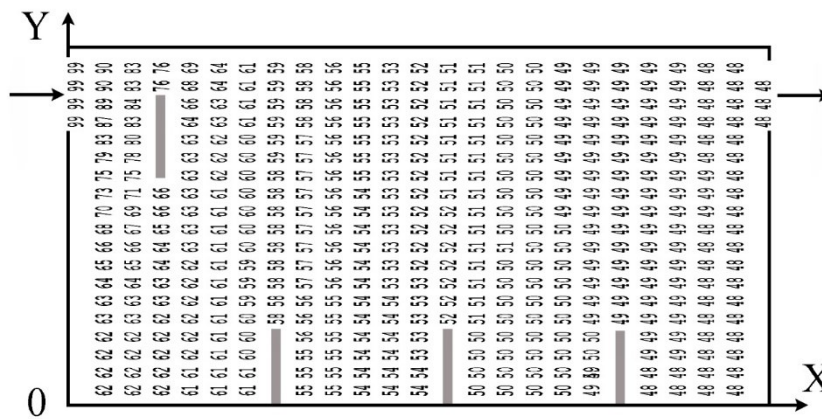


Рисунок 4.21 – Поле концентрації активного мулу (Варіант 1,  $C_{\max}=3$  г/л)

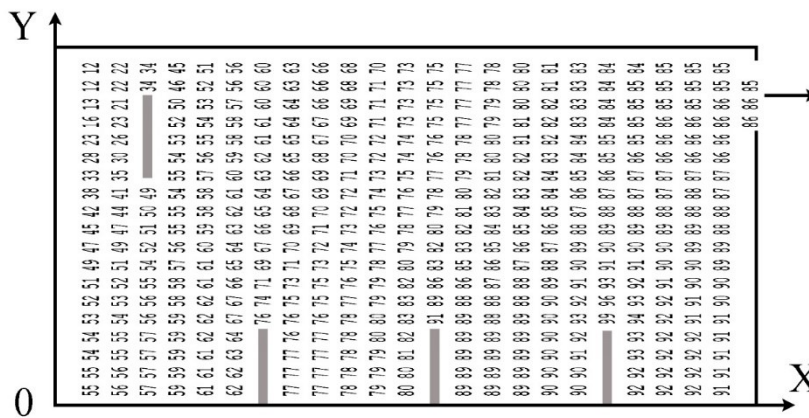


Рисунок 4.22 – Поле концентрації розчиненого кисню (Варіант 1,  $C_{\max}=3.23$  мг/л)

На рис. 4.23 показано концентрацію розчиненого кисню при збільшеній довжині вертикального екрану 2.7 м (Варіант 2).

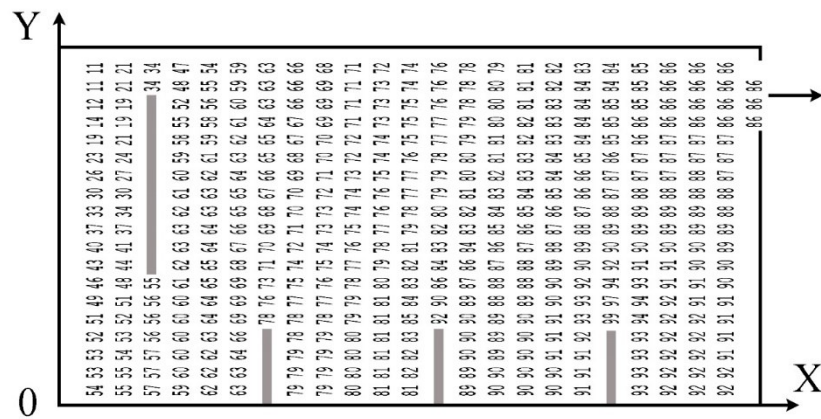


Рисунок 4.23 – Поле концентрації розчиненого кисню (Варіант 2,

$$C_{\max}=3.42 \text{ мг/л}$$

На рис. 4.24 показано концентрацію розчиненого кисню при довжині вертикального екрану 2.3 м та при наявності поряд додаткового екрану, що має довжину 0.81 м, відстань від першого екрану 0.5 м (Варіант 3). Відзначимо, що дана розрахункова область має дуже складну конфігурацію, що суттєво впливає на гідродинаміку: потік стічних вод обтікає кожен екран та рухається в просторі між екранами.

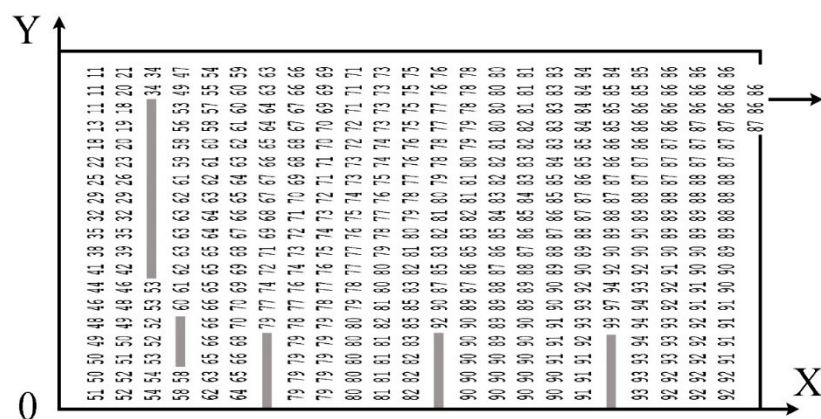


Рисунок 4.24 – Поле концентрації розчиненого кисню (Варіант 3,

$$C_{\max}=3.45 \text{ мг/л}$$

На рис. 4.25 показано концентрацію розчиненого кисню при використанні двох екранів, як для Варіанту 3, та додаткового третього екрану, що має

довжину вертикального екрану 2.3 м та при наявності поряд додаткового екрану, що має довжину 1.89 м та знаходиться на відстані 0.5 м від малого екрану (Варіант 4). Відзначимо, що дана розрахункова область має дуже складну конфігурацію, що суттєво впливає на гідродинаміку: потік стічних вод обтікає кожен екран та рухається в просторі між екранами.

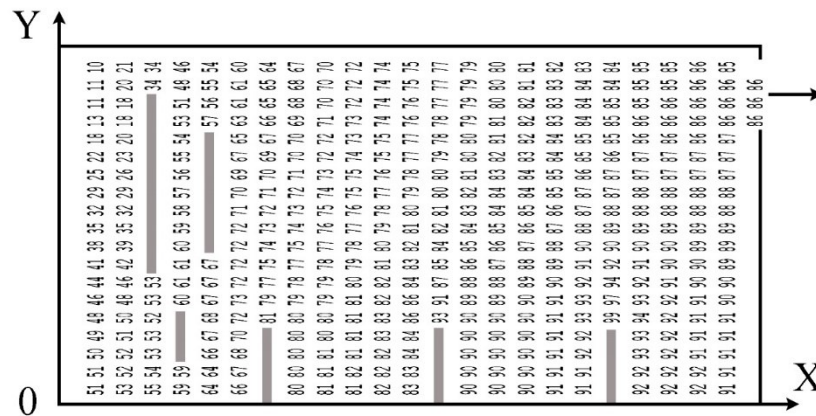


Рисунок 4.25 – Поле концентрації розчиненого кисню (Варіант 4,

$$C_{\max}=3.41 \text{ мг/л)}$$

Як можна бачити з наведених результатів комп'ютерного моделювання, найбільша концентрація розчиненого кисню має місце біля підставок, що можна пояснити близьким розташуванням дифузорів.

Відзначимо, що презентація результатів комп'ютерного моделювання у вигляді матриць концентрації не дає можливості швидко визначити форму області, що «містить» повітря. Далі наведені результати рішення комплексу модельних задач на базі розроблених чисельних моделей. Мета цих досліджень – демонстрація працездатності розроблених CFD моделей для швидкого розрахунку складних задач масопереносу повітря в аеротенках, що мають різні типи подачі повітря – подача у вигляді струменя та подача від дифузорів. Акцент зроблено на визначенні форми та інтенсивності областей, що заповнені повітрям. Для того, щоб чітко бачити (що неможливо зробити при фізичному експерименті) форму, структуру областей в аеротенку, що

наповнені повітрям, використовується інший підхід до презентації результатів комп'ютерного моделювання.

Відзначимо, що приклади рішення задач, що наведені далі на рисунках, відносяться до розрахунку поля концентрації повітря в аеротенку на базі чисельного рішення моделюючого рівняння (2.4). При проведенні комп'ютерного експерименту визначається поле концентрації повітря всередині аеротенку та «будуються» ізолінії концентрації повітря в аеротенку (як приклад, див. рис. 1.20 та рис. 1.21). Визначення навіть однієї концентрації повітря в аеротенку (без врахування процесів взаємодії активного мулу, субстрату та процесу масопередачі повітряних бульбашек до рідини) є важливою задачею згідно ASCE Committee on Oxygen Transfer Standard (USA).

Розглядаються такі сценарії:

1. Подача повітря від системи дифузорів (Сценарій № 1).
2. Подача повітря за допомогою одного струменя (Сценарій № 2).
3. Подача повітря за допомогою одного струменя та при наявності екрану на дні аеротенка (Сценарій № 3).
4. Подача повітря за допомогою одного струменя та при наявності екрану всередині аеротенка (Сценарій № 4).
5. Подача повітря за допомогою двох струменів (Сценарій № 5).

Розрахункові схеми для кожного сценарію показані на рисунках нижче.

Результати комп'ютерного експерименту приведені у вигляді ізоліній концентрації повітря (безрозмірне значення концентрації) в аеротенку. Така презентація даних комп'ютерного моделювання дозволяє швидко аналізувати структуру областей, що формуються в очисній споруді при подачі повітря, та визначати підзони, де недостатньо повітря для забезпечення нормального функціонування аеротенку. Це пов'язано з тим, що течія в споруді та вертикальний рух повітря приводить до формування окремих областей «впливу» дифузора або струменя на ту або іншу частину аеротенку. Тобто, можуть існувати зони, де концентрація повітря може бути недостатньою.

Розрахунок здійснювався при таких безрозмірних даних: швидкість струменю повітря дорівнює 1 (безрозмірне значення); швидкість потоку стічних вод на вході в аеротенк дорівнює 0.02 (безрозмірне значення); швидкість підйому повітря дорівнює 0.3 (безрозмірне значення); ширина «площа отвору вдува»  $0.27 \times 1$  (безрозмірне значення); концентрація повітря в струмені дорівнює 100 од. (безрозмірне значення); інтенсивність емісії повітря від аератора дорівнює 10 одиниць маси/одиниця часу; розміри розрахунковою області  $12.5 \times 2$  (безрозмірне значення).

Розрахунок здійснюється при нульових початкових даних до встановлення рішення за часом. Коефіцієнти дифузії розраховуються так:

$$\mu_x(x, y) = 0,1 \cdot u(i, j), \mu_y(x, y) = 0,1 \cdot v(i, j).$$

Відзначимо, час розрахунку кожного сценарію був 2 с.

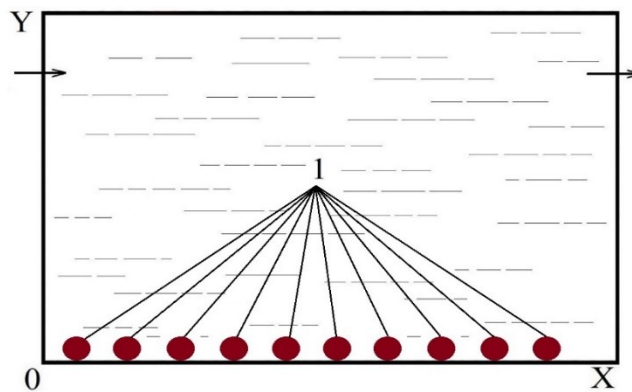


Рисунок 4.26 – Схема розрахункової області (Сценарій № 1): 1 – дифузори

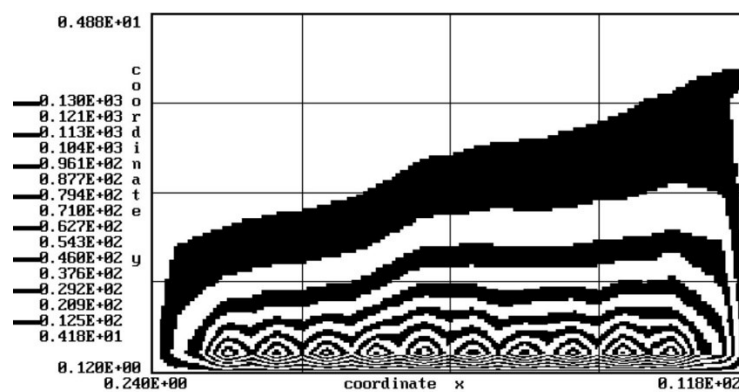


Рисунок 4.27 – Поле концентрації (безрозмірне значення) повітря в аеротенку (Сценарій № 1,  $1 C_{\max}=130$ )

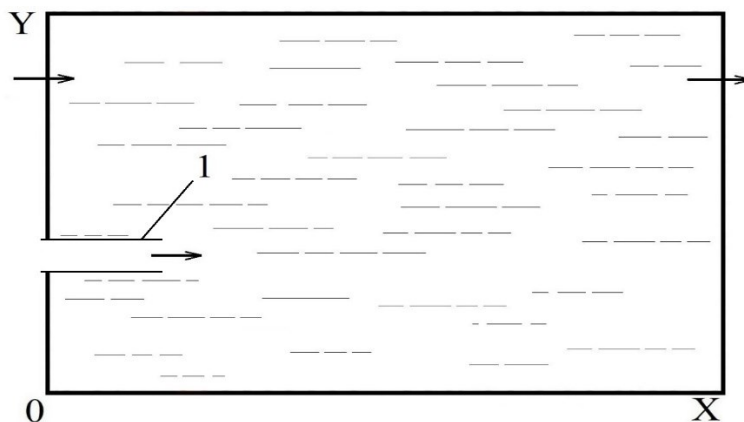


Рисунок 4.28 – Схема розрахункової області (Сценарій № 2): 1 – подача струменя повітря

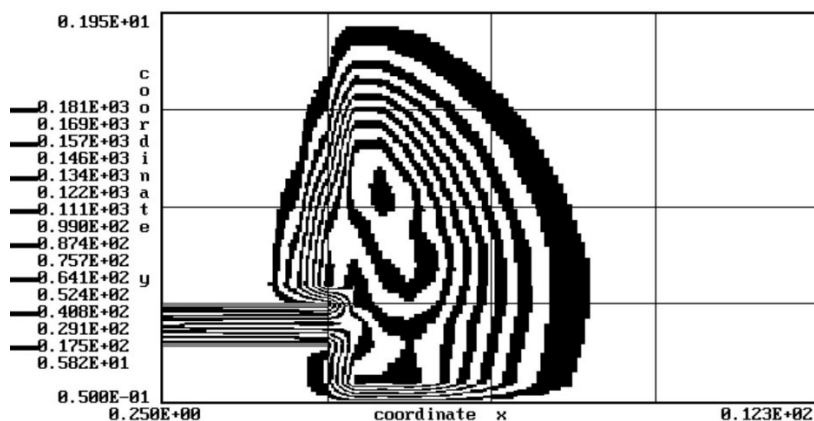


Рисунок 4.29 – Поле концентрації (безрозмірне значення) повітря в аеротенку (Сценарій № 2,  $C_{\max}=181$ )

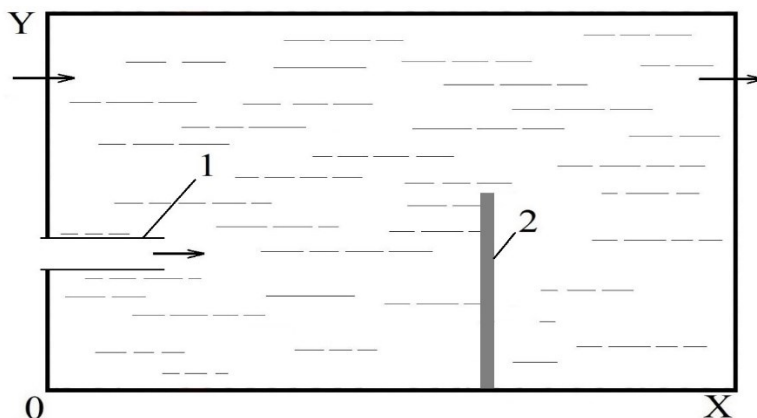


Рисунок 4.30 – Схема розрахункової області (Сценарій № 3): 1 – подача струменя повітря; 2 – екран

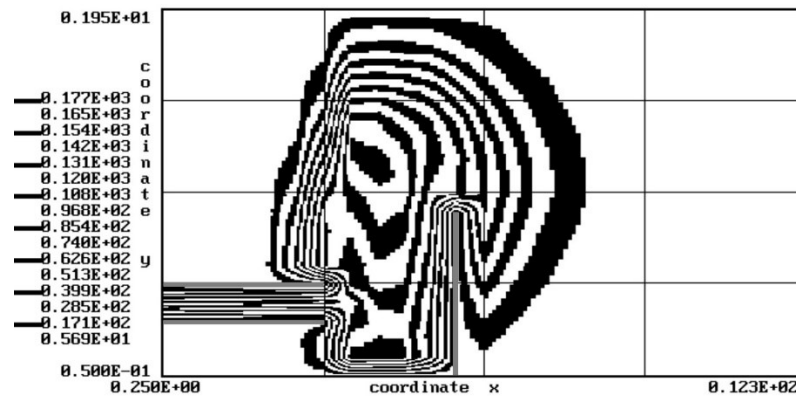


Рисунок 4.31 – Поле концентрації (безрозмірне значення) повітря в аеротенку (Сценарій № 3,  $C_{\max}=177$ )

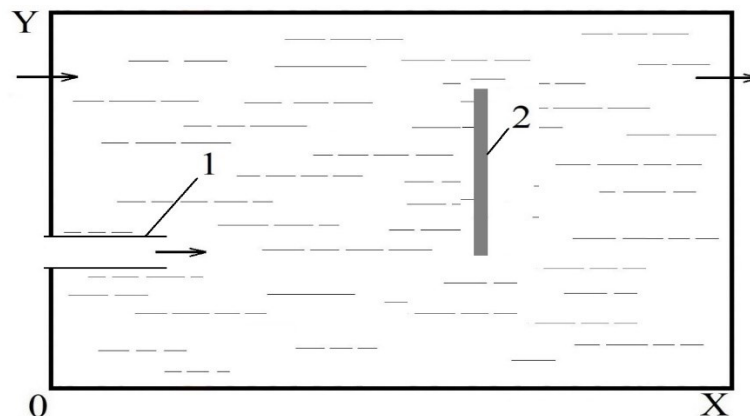


Рисунок 4.32 – Схема розрахункової області (Сценарій № 4): 1 – подача струменя повітря; 2 – екран

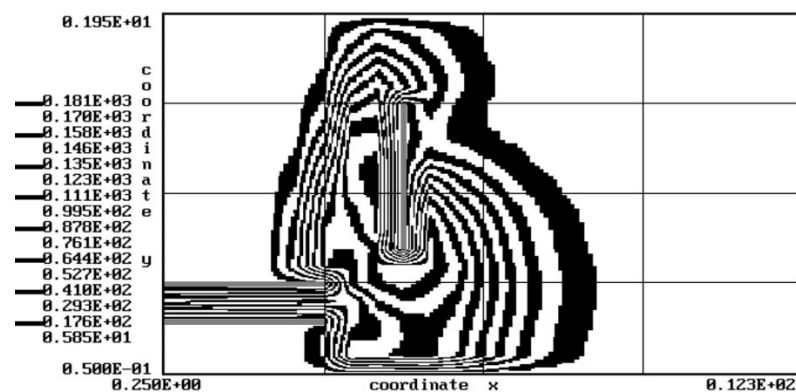


Рисунок 4.33 – Поле концентрації (безрозмірне значення) повітря в аеротенку (Сценарій № 4,  $C_{\max}=181$ )

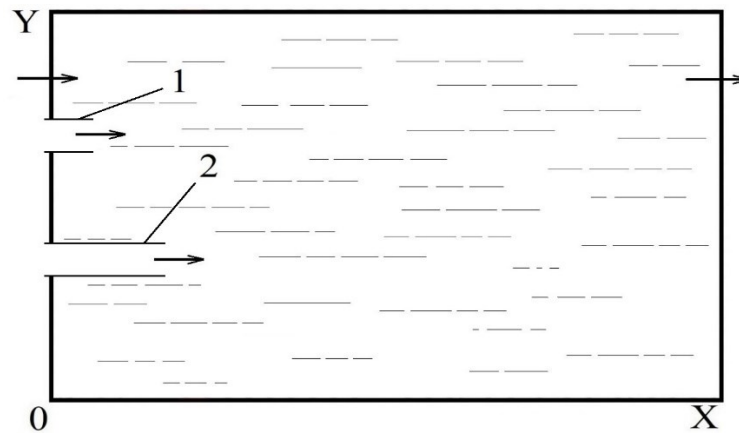


Рисунок 4.34 – Схема розрахункової області (Сценарій № 5): 1 – подача струменя повітря; 2 – подача струменя повітря

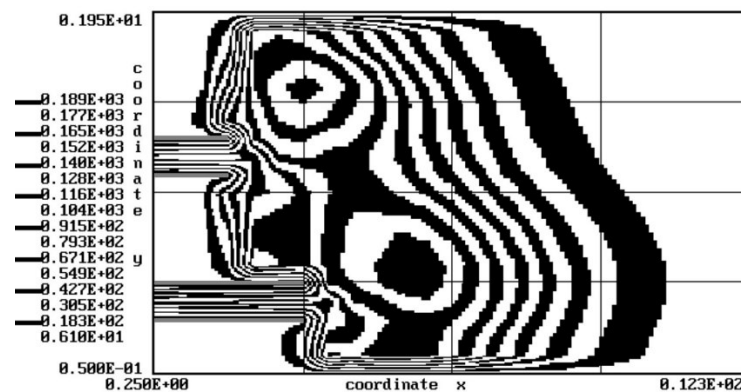


Рисунок 4.35 – Поле концентрації (безрозмірне значення) повітря в аеротенку (Сценарій № 5,  $C_{\max}=189$ )

Аналіз даних комп'ютерного моделювання дає можливість визначити форму та структуру областей, що «наповнені» повітрям. Так, для Сценарію №1 біля кожного дифузора формується область зі значним градієнтом концентрації повітря. Ця область має форму «кола» (дивись, для прикладу рис. 1.21). Далі, область, що містить повітря, поширюється вгору внаслідок його вертикального руху та витягується в бік виходу стічних вод з аеротенку. Для Сценарію №2 можна виділити дві підзони: перша підзона формується безпосередньо в повітроводі, що подає повітря в аеротенк, друга підзона

формується всередині аеротенку та має тенденцію до руху вгору внаслідок підйому повітря в споруді. Для Сценаріїв №3 та №4 – аналогічна ситуація, крім цього, чітко можна бачити, що наявність екрану деформує область, що зайнята повітрям. Але, для Сценарію №3 – область, що заповнена повітрям, «обходить» екран зверху, а для Сценарію №4 – ця область «обходить» екран зверху та знизу. Крім цього, можна бачити формування застійних зон за екраном. Для Сценарію №5 можна чітко бачити, що взаємодія двох струменів призводить до формування складної за формою області, що містить повітря в аеротенку: всередині очисної споруди формуються дві підзони, що мають форму «кола», та характеризуються великим градієнтом концентрації повітря.

Як можна бачити з наведених результатів комп'ютерного моделювання, розроблені моделі дають можливість швидко отримати прогностні дані щодо форми та інтенсивності концентраційних полів повітря в аеротенку при різних схемах подачі повітря в аеротенк та при складній гідродинаміці потоку: взаємодія струменя повітря з рухом стічних вод в аеротенку + вертикальний рух повітря. Розрахунковий час на рішення одного сценарію – 2 с.

Слід підкреслити, що при рішенні всіх розглянутих задач розроблені CFD (чисельні) моделі показали стійкість, що є вкрай важливим для їх практичного використання, коли розглядаються аеротенки різної конфігурації та різні схеми подачі повітря в очисну споруду.

#### **4.4 Моделювання кисневого режиму в аеротенках на базі тривимірних CFD моделей**

Моделювання здійснюється на базі тривимірних CFD (чисельних) моделей, що розроблені в Розділі 3 роботи. Досліджуваний процес базується на використанні системи рівнянь масопереносу та гідродинаміки, що розглянуті в Розділі 2. Як було відзначено вище, аналіз кисневого режиму базується на сумісному рішенні тривимірних рівнянь масопереносу активного мулу, субстрату, повітря та розчиненого кисню в аеротенку (Розділ 2). З

математичної точки зору, тривимірні рівняння масопереносу є лінійними, але рівняння Monod, що пов'язують такі параметри, як концентрація активного мулу, концентрація субстрату, концентрація розчиненого кисню, роблять систему моделюючих рівнянь нелінійною. Тобто, на концентрацію розчиненого кисню в кожній точці аеротенку впливає концентрація в даній точці активного мулу, субстрату, повітря та значення концентрації розчиненого кисню на даному часовому кроці.

В чисельній моделі коефіцієнти дифузії розраховуються так:

$$\begin{aligned}\mu_x(x, y, z) &= 0,1 \cdot u(i, j, k), \\ \mu_y(x, y, z) &= 0,1 \cdot v(i, j, k), \\ \mu_z(x, y, z) &= 0,1 \cdot w(i, j, k).\end{aligned}\tag{4.2}$$

Тобто, значення коефіцієнтів дифузії в різних точках аеротенку – різне, це значення залежить від локального значення швидкості потоку в аеротенку. Для розрахунку значень коефіцієнтів дифузії на першому кроці вирішується задача гідродинаміки – визначається просторове значення швидкості течії в аеротенку. Моделювання здійснюється при розташуванні в аеротенку дифузorzів. Розрахунок концентрацій здійснюється в такій послідовності:

1. Рішення 3D задачі гідродинаміки та визначення поля швидкості потоку в аеротенку.
2. Розрахунок локальних 3D значень коефіцієнтів дифузії.
3. Рішення 3D рівняння масопереносу субстрату в аеротенку.
4. Рішення 3D рівняння масопереносу активного мулу в аеротенку.
5. Рішення 3D рівняння масопереносу повітря в аеротенку.
6. Рішення 3D рівняння масопереносу розчиненого кисню в аеротенку.
7. Рішення рівняння масопереносу кисню від повітря до розчиненого кисню в кожному контрольному елементі (різницеvій комірці).
8. Рішення рівнянь Monod.

Схема розрахункової області показана на рис. 4.36: всередині аеротенку розташовані дві перешкоди, що впливають на гідродинаміку течії. Емісія повітря відбувається за допомогою дифузорів.

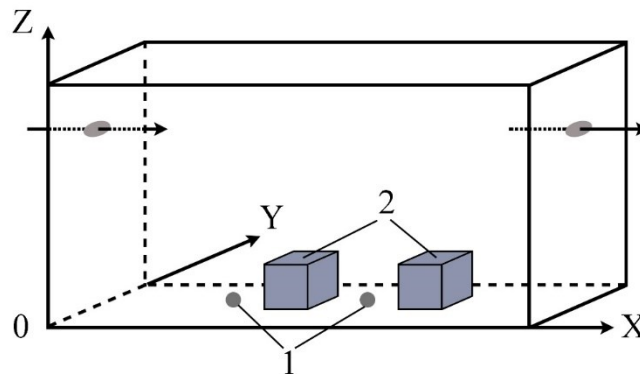


Рисунок 4.36 – Схема розрахункової області (3D CFD моделювання): 1 – місце розташування дифузорів; 2 – перешкоди

Обчислювальний експеримент проводився при таких параметрах:

$$K_d = 0.055 \text{ 1/доб};$$

$S_{in} = 130 \text{ мг/л}$  – концентрація субстрату (БПК<sub>пов</sub>), що потрапляє в аеротенк;

$$X_{in} = 2 \text{ г/л} – \text{концентрація активного мулу, що потрапляє в аеротенк};$$

$$\mu_{\max} = 1.04;$$

$$K_s = 100 \text{ мг/л};$$

$$Y = 0.55;$$

$$DO_{\max} = 9.1 \text{ мг/л};$$

$$\mu_{\max} = 1.04;$$

$$K_{DO} = 0.05;$$

$$K_{La} = 9 \text{ (1/год)};$$

інтенсивність подачі повітря 0.007 кг/с; швидкість руху повітря 10 см/с; швидкість стічних вод на вході в аеротенк 0.0003 м/с; розміри розрахункової області 7м×5м×5м.

Розрахунок здійснюється при нульових початкових даних. Коефіцієнти дифузії розраховуються за (4.2).

Тобто, коефіцієнти дифузії залежать від локального значення швидкості в аеротенку.

Далі на рисунках показано поле концентрації активного мулу, субстрату, розчиненого кисню в аеротенку для моменту часу  $t=4,84$  год. Кожне число показує значення концентрації у відсотках від максимального значення параметру  $C_{\max}$  в кожному перерізі. Друк чисел здійснено в форматі INTEGER, тобто друкується лише ціла частина числа.

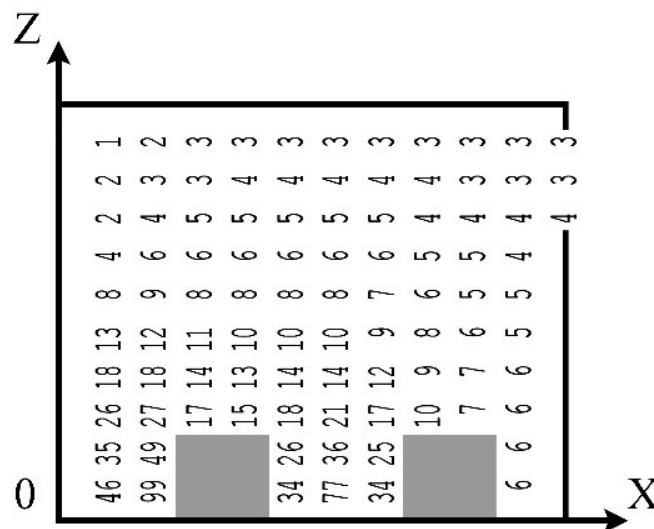


Рисунок 4.37 – Концентрація розчиненого кисню (переріз  $y=3.2$  м,  
 $C_{\max}=8.3$  мг/л)

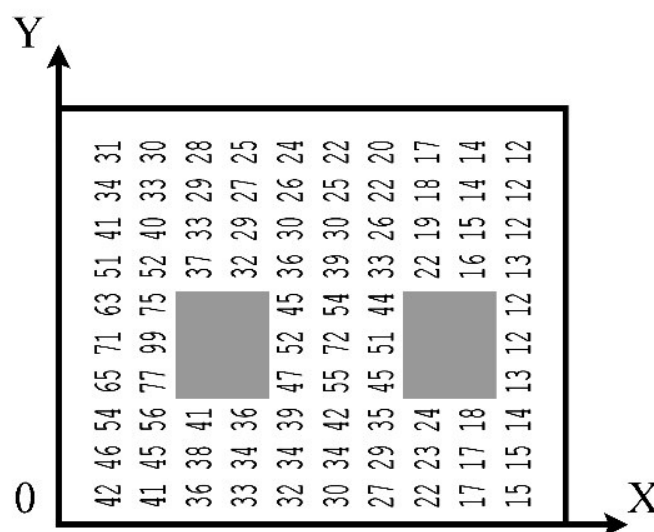


Рисунок 4.38 – Концентрація розчиненого кисню (переріз  $z=0.62$  м,  
 $C_{\max}=6.7$  мг/л)



досить високою концентрацією повітря на дні, в межах 31-39 % від максимальної концентрації.

Час розрахунку даної задачі - 7 с.

#### 4.5 Визначення раціонального міста розташування аератору в аеротенку

Нижче наведені результати обчислювального експерименту на базі розробленого методу експрес розрахунку раціонального місця розташування аератору в аеротенку. Опис цього методу наведено в Розділі 2 та Розділі 3. Основою методу є чисельне рішення спряженого рівняння масопереносу. Так як запропонований метод відноситься до методів експрес розрахунку, то при його реалізації використовуються рівняння гідродинаміки (визначення поля швидкості потоку) та спряжене рівняння масопереносу повітря в аеротенку. Важливою особливістю методу є те, що враховується складна конфігурація аеротенку та швидкість розрахунку. Суть методу полягає в тому, що на першому етапі визначається поле швидкості потоку в аеротенку (результати рішення задачі гідродинаміки), далі вирішується спряжене рівняння масопереносу повітря від аератору. Результатом рішення є поле концентрації повітря в аеротенку, що є важливою інформацією для оцінювання кисневого режиму (згідно ASCE Committee on Oxygen Transfer Standard, USA, A. Karpinska, J. Bridgeman, J. Voog, T. Kalbacher, J. Nivala). Так як в повітрі міститься порядку 20 % кисню, то після розрахунку концентрації повітря всередині аеротенку, в кожному контрольному елементі робиться перерахунок цієї концентрації до концентрації кисню, тобто:

$$C_{\text{концентрація кисню}} = 0.2 \cdot C_{\text{концентрація повітря}}$$

Дане значення кисню в кожному контрольному елементі друкується для користувача. Таким чином, розроблений метод дає «потенціальне» значення

концентрації кисню в різних точках аеротенку, що може буде «використане» для процесу масопереносу кисню від повітряних бульбашок до розчиненого кисню. Далі приведені результати рішення модельної задачі, що показує принцип роботи розробленої чисельної моделі.

Обчислювальний експеримент проводився при таких даних: розміри розрахункової області  $12\text{м} \times 6\text{м}$ ; швидкість стічних вод на вході в аеротенк  $0.0005\text{ м/с}$ ; інтенсивність емісії повітря  $0.06\text{ кг/с}$ . Для практичної реалізації розробленого метода потрібно вибрати в області дослідження «реперну» точку, тобто точку, де проектувальник бажає, щоб концентрація кисню дорівнювала конкретному значенню, наприклад, не менше ніж  $5\text{ мг/л}$ . Для прикладу, на рис. 4.42 така точка показана червоним «колом».

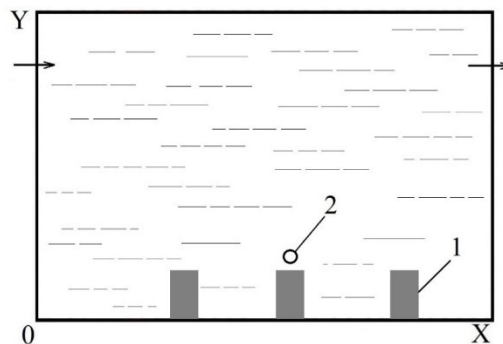


Рисунок 4.41 – Схема розрахункової області 1 – підставка; 2 – реперна точка

Далі здійснюється розрахунок та результати розрахунку представляються у вигляді матриці функціоналу (рис.4.30). Реперна точка на цій матриці показана, як червоне «коло».

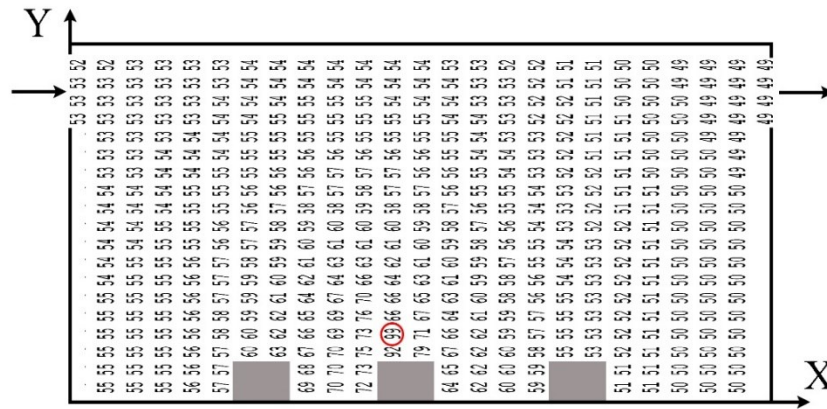


Рисунок 4.42 – Значення функціоналу ( $C^*_{\max}=37.3$ )

Далі здійснюється аналіз матриці функціоналу. Цей функціонал показує, що якщо аератор з тією інтенсивністю подачі повітря, що буде використовувати проєктувальник, розташувати в точці, де, наприклад, значення функціоналу дорівнює «60», то в реперній точці значення концентрації повітря буде:  $0.6 \cdot C^*_{\max} = 22$  мг/л, а концентрація кисню в цій точці:  $22 \text{ мг/л} \cdot 0.21 = 4.6$  г/л. Відзначимо, що це не концентрація розчиненого кисню, а концентрація кисню в повітрі, що знаходиться в конкретному контрольному елементі. Саме ця концентрація буде далі використовуватися для розрахунку масопередачі кисню в форму розчиненого кисню. Таким чином, проєктувальник, аналізуючи значення функціоналу, може визначити раціональне місце розташування аератора, наприклад, на дні аеротенку. Розрахунок може бути зроблено для іншої реперної точки та іншого значення інтенсивності емісії повітря.

#### Висновки до розділу 4

1. Розглянуто застосування розроблених CFD моделей для розв'язання складних задач по визначенню концентраційних полів розчиненого кисню в аеротенках, що мають складну конфігурацію.

2. Наведені результати показують, що розроблені CFD моделі дають можливість отримати прогностичні дані щодо значення концентрації активного мулу, субстрату, повітря, розчиненого кисню в аеротенках при різних типах подачі повітря в споруду для біологічного очищення води (подача повітря з дифузорів або у вигляді струменя).

3. Результати обчислювальних експериментів показують, що розроблені чисельні моделі дають можливість отримати детальну інформацію по розподілу параметрів в будь-якій точці аеротенку, що є важливим для аналізу ефективності біологічного очищення води та визначення областей всередині споруди, де має місце нестача кисню.

3. Особливістю побудованих CFD моделей є те, що вони враховують найбільш суттєві параметри, що мають комплексний вплив на процес біологічного очищення стічних вод та формування кисневого режиму всередині аеротенку: гідродинаміку, нерівномірне поле коефіцієнтів дифузії, інтенсивність аерації, положення отворів для вприскування активного мулу, субстрату, процеси між активним мулом, субстратом та киснем (рівняння Monod), положення дифузорів, наявність екранів в очисній споруді.

4. За допомогою розроблених моделей є можливість заздалегідь визначати раціональне місце розташування аератора в очисній споруді.

5. Результати обчислювального експерименту представлені у вигляді матриць концентрації шуканих параметрів, що дає можливість проєктувальнику швидко та без екстраполяції визначати значення параметру всередині споруди в будь-якій точці. Це сприяє швидкому аналізу результатів моделювання, що важливо при проведенні серії розрахунків.

6. Особливо важливо відзначити, що побудовані CFD моделі потребують незначного часу при практичній реалізації на комп'ютері.

## ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ

У дисертації розглянуто вирішення важливої науково-практичної задачі – розробка методів оцінки кисневого режиму в аеротенках. В дисертації отримано такі результати:

1. Системний аналіз наукових публікацій показав, що на етапі проектування або реконструкції аеротенків особливо важливу роль грають теоретичні методи; найбільш широко використовуються емпіричні моделі, але моделі даної групи не дозволяють дослідити гідродинаміку в аеротенках та не враховують їх конфігурацію, що суттєво зменшує ефективність таких моделей, особливо при проектуванні аеротенків або їх реконструкції на нові умови експлуатації.

2. На підставі аналізу літературних джерел визначено, що найбільш потужним інструментом теоретичного розв'язку задач, що виникають на етапі проектування або реконструкції аеротенків, є використання багатофакторних CFD моделей та створених на їх базі пакетів прикладних програм; але для реалізації цього підходу потрібно мати дуже потужні комп'ютери, що обмежує можливість використання таких моделей проєктувальниками. Крім цього, такі моделі потребують значної кількості вхідних параметрів, які потрібно визначати експериментальним шляхом – це суттєво збільшує вартість проєктних робіт.

3. Розроблено швидкорозрахункові 2D CFD моделі для комплексного дослідження процесів масопереносу активного мулу, субстрату, розчиненого кисню, повітряних бульбашок в аеротенках; розроблені моделі враховують гідродинаміку в аеротенку та не мають обмежень на конфігурацію аеротенку.

4. Розроблено 3D CFD моделі для комплексного дослідження процесів масопереносу активного мулу, субстрату, розчиненого кисню, повітряних бульбашок в аеротенках; розроблені моделі враховують гідродинаміку в аеротенку та не мають обмежень на конфігурацію аеротенку.

5. Вперше розроблено швидкорозрахункові чисельні моделі для визначення раціонального місця розташування аератору в аеротенках шляхом рішення спряженого рівняння масопереносу.
6. Розроблено 2D чисельну модель поширення пилу, що потрапляє в аеротенк при роботі аератору.
7. Створено комп'ютерні програми для проведення обчислювальних експериментів на базі побудованих CFD моделей; дані комп'ютерні програми представляють сучасний інструмент наукового дослідження шляхом проведення багатофакторного обчислювального експерименту.
8. Верифікація побудованих моделей показала їх адекватність процесам масопереносу, що досліджуються в роботі.
9. Проведений комплекс комп'ютерних експериментів на базі розроблених CFD моделей показав, що моделі мають широкий робочий діапазон та дають можливість отримати прогностні дані за декілька секунд.
10. Розроблені моделі та комп'ютерні програми використовуються в практичній діяльності Філії «Проектно-вишукувальний інститут залізничного транспорту» АТ «Українська залізниця» та в навчальному процесі Українського державного університету науки і технологій.

## 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/ Допов. Нац. акад. наук України. 2017. № 6. С. 21 – 27.
2. Беляев Н. Н. Математическое моделирование массопереноса в горизонтальных отстойниках: монографія. Д.: Акцент ПП, 2015. 115 с.
3. Беляев Н. Н. Математическое моделирование массопереноса в отстойниках систем водоотведения: монографія. Д.: Нова ідеологія, 2012. 112 с.
4. Беляев Н. Н., Козачина В. А. CFD моделирование работы горизонтального отстойника со струенаправляющими пластинами. Вода та водоочисні технології. Науково-технічні вісті. К., 2014. №2 (15). С. 50-55.
5. Біляєв М.М., Коваленко А.С., Козачина В.В., Скуратов М.О., Чірков А.О. Математичне моделювання динаміки водних потоків. Тези. XVII Міжнародної науково-практичної конференції «Сучасні інформаційні та комунікаційні технології на транспорт, в промисловості і освіті» Присвячено пам'яті Владислава Скалозуба.(Дніпро, 12.12.2024 – 13.12.2024 рр.) С.112.
6. Біляєв М. М., Козачина В. А., Гунько О. Ю., Лемеш М. В. Комп'ютерне моделювання процесів біологічної очистки води: монографія. Дніпро: Журфонд, 2023. 186 с.
7. Біляєв М.М., Козачина В.В., Коваленко А.С., Чірков А.О., Чирва М. В. Математичне моделювання процесів масопереносу та гідродинаміки. Матеріали VII Міжнародної науково-технічної конференції Комп'ютерне моделювання та оптимізація складних систем (Дніпро, 1-3 листопада 2023р.) С.30.
8. Біляєв М. М., Машихіна П. Б., Победьонний Р. П., Чірков А. О., Чирва М. В. Математична модель аналізу кисневого режиму в біореакторі. Наука та прогрес транспорту. 2023. № 1 (105). С. 5–12. DOI: 10.15802/stp2024/303085.

9. Біляєв М. М., Машихіна П. Б., Татарко Л. Г., Чірков А. О., Чирва М. В. Експрес-розрахунок кисневого режиму в очисних спорудах. Український журнал будівництва та архітектури. 2023. № 6 (018). С. 29–34. DOI: 10.30838/J.BPSACEA.2312.261223.29.1004.
10. Біляєв М. М., Тимошенко О. А., Калашников А. В., Коваленко А. С., Чірков А. О. Аналіз процесів масопереносу на базі чисельних моделей. Український журнал будівництва та архітектури. 2024. № 6 (024). С. 55–63. DOI: <https://doi.org/10.30838/UJCEA.2312.271224.55.1111>.
11. Біляєв М.М., Чірков А.О., Чирва М.В., Коваленко А.С. Математичні моделі при розрахунку очисних споруд . Conference proceedings. XIII International scientific and practical conference. A substantive representation of the system of scientific knowledge. (March 27-28 Riga, Latvia) С.75.
12. 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 –КМХТ. 2019. С. 290 -293.
13. Бомба А. Я., Сафоник А. П. Математичне моделювання процесу аеробного очищення стічних вод в пористому середовищі. Математичне та комп'ютерне моделювання. 2011. С. 36 -44.
14. Василенко А. И., Василенко А. А. Проектирование канализации населенных мест. 2-е изд., перераб. и доп. К.: Будівельник, 1985. 136 с.
15. Василенко О. А., Епоян С. М. Водовідведення та очистка стічних вод міста. Курсове і дипломне проектування. Приклади та розрахунки: навч. посіб. Київ, Харків: КНУБА, ХНУБА, ТО Ексклюзив, 2012. 540 с.
16. Водовідведення і очищення стічних вод міста: навч. посіб./ С. М. Епоян, Г. М. Смірнова, І. В. Корінько, С. П. Пашкова, В. Ю. Сорокіна, Г. Вевелер. Харків: Видавнична група «РА Каравела», 2003. 144 с.
17. Водопостачання та очистка природних вод: навч. посіб./ С. М. Епоян, В. Д. Колотило, О. Г. Друшляк, Г. І. Сухоруков, Т. С. Айрапетян. Х.: Фактор, 2010. 192 с.

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

19. ДБН В.2.5-75:2013. Каналізація. Зовнішні мережі та споруди. Основні положення проектування. К.: Міністерство регіонального розвитку, будівництва та житлово-комунального господарства України, 2013. 128 с.

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

21. Епоян С. М., Сухоруков Д. Г. До розрахунку горизонтального відстійника з пористою полімербетонною перегородкою систем господарсько-питного водопостачання. Науковий вісник будівництва. Харків: ХНУБА, ХОТВ АБУ, 2012. Вип. 68. С. 244-248.

22. Епоян С. М., Сухоруков Д. Г. Особливості роботи пористої полімербетонної перегородки водопровідного горизонтального відстійника і її регенерація. Науковий вісник будівництва. Харків: ХНУБА, ХОТВ АБУ, 2012. Вип. 69. С. 327-331.

23. Закон України «Про Загальнодержавну цільову програму «Питна вода України» на 2006-2020 роки»: офіц. текст прийнятий Верх. Радою України 3 березня 2005 р.: зі змінами та доп. станом на 13 листопада 2011 р. / Офіційний веб-сайт Верховної Ради України. Режим доступа к информации: <http://zakon4.rada.gov.ua/laws/show/2455-15/paran15#n15> 9.

24. Карагяур А. С. Дослідження впливу конструктивних параметрів контактної камери на ефективність перемішування озону з водою. Науковий вісник будівництва. Харків: ХДТУБА, ХОТВ АБУ, 2008. Вип. 47. С. 241-244.

25. Карагяур А. С., Сыроватский А. А., Бабенко С. П. Тонкослойный отстойник с усовершенствованными устройствами подвода-отвода воды. Науковий вісник будівництва. Харків: ХДТУБА, ХОТВ АБУ, 2011. Вип. 65. С. 349-353.

26. Ковальчук В. А. Очистка стічних вод: навч. посіб. Рівне: ВАТ «Рівненська друкарня», 2002. 622 с.
27. Козачина В. А. Моделирование процесса массопереноса в отстойнике при импульсной подаче примеси. Науковий вісник будівництва. ХНУБА, 2015. №1 (79). С. 162-165.
28. Козачина В.В., Коваленко А.О., Чірков А.О. Експериментальне та теоретичне дослідження процесів тепломасопереносу. Всеукраїнська науково-технічна конференція студентів і молодих учених «Наука і сталий розвиток транспорту 2024» Дніпро. С.207-208.
29. Корінько І. В., Панасенко Ю. О. Інноваційні технології водопідготовки. Х.: ХНАМГ, 2012. 208 с.
30. Моделювання процесу очищення стічних вод на базі камерних моделей. Наука та прогрес транспорту/ М. В. Лемеш, М. М. Біляєв, Л. Г. Татарко, З. М. Якубовська. 2020. № 3 (87). С. 15–23.
31. Метод численного решения уравнений течения вязкой жидкости в переменных скорость-давление/ Е. В. Бруяцкий, А. Г. Костин, Е. И. Никифорович, Н. В. Розумнюк. Прикладна гідромеханіка. К.: Інститут гідромеханіки НАН України, 2008. Т. 10. № 2. С. 13-23.
32. Олейник А. Я., Ягодовская О. М., Маслун Г. С. Расчеты аэротенка-смесителя вместе с вертикальным вторичным отстойником. Проблемы водопостачання, водовідведення та гідравліки: наук.-техн. збірник. К.: КНУБА, 2009. №13. С. 49-62.
33. Олійник О. Я., Айрапетян Т. С. Теорія і розрахунки біологічної очистки стічних вод в аэротенках зі зваженим (вільноплаваючим) і закріпленим на додаткових пристроях біоценозом. Прикладна гідромеханіка. 2015. Т. 17. № 3. С. 35 – 43.
34. Олійник О. Я., Зябліков С. В. Особливості моделювання очистки стічних вод у системі аэротенк-відстійник-регенератор. Проблемы водопостачання, водовідведення та гідравліки: наук.-техн. збірник. К.:КНУБА, 2006. №7. С. 65-82.

35. 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.

36. **Победьонний Р.П., Чірков А.О. Моделювання нестационарних процесів в очисних спорудах. Всеукраїнська науково – технічна конференція студентів і молодих учених «Наука і сталий розвиток транспорту 2023».** **Дніпро. С.100-101.**

37. Поляков В. Л. Моделирование биофильтрации воды с ограниченным содержанием органического субстрата. Биореактор-фильтр/ Доповіді НАН України. Науково-теоретичний журнал Президії Національної академії наук України. К.: НАН України, 2011. № 7. С. 58-66.

38. Василенко А. А., Грабовский П. А., Ларкин Г. М. и др. Реконструкция и интенсификация сооружений водоснабжения и водоотведения. Киев - Одесса: КНУСА, ОГАСА, 2007. 307 с.

39. Саблій Л. А. Моделювання процесів очищення стічних вод в біореакторах з іммобілізованими мікроорганізмами/ Вісн. Національного університету водного господарства та природокористування. Вип. 4(56). 2011. С. 83 -90.

40. 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.

41. Сафоник А. П., Таргоній І. М., Лакус П. О. Моделювання та дослідження процесу біологічної очистки води з урахуванням температурного режиму. Вісн. ЖДТУ. 2019. № 1 (83). С. 115 -125.

42. Современные технологии очистки воды/ В. В. Гончарук, Д. Д. Кучерук, А. О. Самсоны-Тодоров, В. Ф. Скубченко. Наука та інновації. 2006. Т. 2. № 5. С. 66-77.

43. Степова Н. Г. Апробація одновимірної математичної моделі, що описує процеси у вторинному відстійнику вертикального типу/ Проблеми

водопостачання, водовідведення та гідравліки: наук.-техн. збірник. К.: КНУБА, 2009. №13. С. 81-90.

44. Тугай А. М., Орлов В. О. Водопостачання. К.: Знання, 2009. 735 с.

45. Тугай А. М., Терновцев В. О., Тугай Я. А. Розрахунок і проектування споруд систем водопостачання. К.: КНУБА, 2001. 254 с.

46. Фізико-хімічні та біологічні методи очистки стічних вод/ С. М. Епоян, Р. І. Назарова, Л. П. Снагощенко, Ю. М. Данченко, В. А. Андронов, Т. М. Обіженко. Навч. посіб. Харків: Вид. «Міськдрук», 2012. 452 с.

47. Хоружий П. Д., Хомутецька Т. П., Хоружий В. П. Ресурсозберігаючі технології водопостачання. К.: Аграрна наука, 2008. 534 с.

48. Чірков А.О., Чирва М.В., Коваленко А.С. Моделювання систем очистки стічних вод. Conference proceedings. XI «Implementation of modern scientific opinions in practice» (Bilbao, Spain. March 20-22, 2023) С.262.

49. Эпоян С. М., Душкин С. С. Технологические схемы очистки воды, условия их применения/ Наук. вісн. будівництва. Харків: ХНУБА, ХОТВ АБУ, 2012. Вип. 69. С. 327-331.

50. Alma Mañicг, Jessica Bengtsson, Magnus Christensson. Measuring and modeling the oxygen profile in a nitrifying Moving Bed Biofilm Reactor. Mathematical Biosciences 227 (2010) . Pp. 1–11.

51. Alqahtani, Rubayyi Turki. Modeling of biological wastewater treatment, Doctor of Philosophy Thesis, School of Mathematics and Applied Statics, University of Wollongong, 2013. 329 p.

52. Anna Montras Boet. Mathematical modeling and molecular analysis of nitrifying packed bed biofilm reactor/ PhD Thesis, Universitat Autònoma de Barcelona, Barcelona, 2009. P. 231.

53. Andersson B., Andersson R., Hakansson L., Mortensen M., Sudiyo R., and Van Wachem B. (2012). Computational Fluid Dynamics for Engineers, Cambridge University Press. DOI: 10.1017/CBO9781139093590

54. 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.
55. Biliaiev M. M., Chirkov A. O. Hierarchy of Mathematical Models for Calculating Aeration Tanks. Science and Transport Progress. 2026. № 1(113). P. 17–23. DOI: <https://doi.org/10.15802/stp2026/352713>
56. Biliaiev M., Gunko E., Lemesh M. Simulation of Aeration Tank Work. Collection of Research Papers of National Mining University. 2018. № 53. С. 230-237.
57. 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.
58. Biliaiev M. M., Kozachyna V. A., Kyrychenko M. V., Skuratov M. O., Chirkov A. O., Filonenko H. K. Mathematical Models for Water Treatment Problems. Наука та прогрес транспорту. 2025. № 1. С. 5–13. DOI: [10.15802/stp2025/324157](https://doi.org/10.15802/stp2025/324157)
59. 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.
60. 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.
61. Biliaiev M., Savina O., Lemesh M., Tsurkan V. Biological wastewater treatment in aeration tanks. Collection of Research Papers of National Mining University. 2018. № 55. Pp. 325-333.
62. Brannock M. Mixing characterisation of full-scale membrane bioreactors: CFD modelling with experimental validation Water Res. 2010. 44(10)/ P.P. 3181-91

63. Brannock M. Computational Fluid Dynamics Tools for the Design of Mixed Anoxic Wastewater Treatment Vessels. [Ph.D. Thesis, Department of Environmental Engineering, University of Queensland]. 2003.
64. Brdjanovic D., Meijer S. C., Lopez-Vazquez C. M., Hooijmans C. M., van Loosdrecht M. C. (Eds.) Applications of Activated Sludge Models; IWA Publishing: London, UK, 2015. [Google Scholar].
65. Burger R., Faras S., Nopens I. Simulation of the secondary settling process with reliable numerical methods/ Watermatex: 8th IWA Symposium on Systems Analysis and Integrated. Spain, San Sebastian, 2011. Pp. 21-28.
66. Christopher Goode. Understanding biosolids dynamics in a moving bed biofilm reactor/ Thesis, Department of Chemical Engineering and Applied Chemistry University of Toronto. 2010. P. 216.
67. Climent J. A comprehensive hydrodynamic analysis of a full-scale oxidation ditch using Population Balance Modelling in CFD simulation, Chem. Eng. J. № 374. 760 p. DOI: 10.1016/j.cej.2019.05.195
68. Biological reactor retrofitting using CFD-ASM modelling. Chem. Eng./ J. Climent, L. Basiero, R. Martínez-Cuenca, J. Berlanga, B. Julián-López, S. Chiva. Journal. 2018. 348, 1–14. [Google Scholar] [CrossRef].
69. Cockx et al. Global and local mass transfer coefficients in waste water treatment process by computational fluid dynamics Chem. Eng. Process. Process Intensif. 2001 40(2). P.P. 187-194
70. 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. EWA, 2006. Pp. 1-17.
71. Fayolle Y., Gillot S., Cockx Arnaud, Bensimhon Laetitia, Roustan Michel, Héduit A. In situ characterisation of local hydrodynamic parameters in closed-loop aeration tanks Chem. Eng. J. 2010.
72. Gevod, V.S., Borysov, I.A., Kovalenko, I.L. Reliable and Accessible Point-of-use Water Denitrification System. Voprosy Khimii i Khimicheskoi

Tekhnologii. № 2. P. 58–66. DOI: <http://dx.doi.org/10.32434/0321-4095-2025-159-2-58-66>

73. Griborio A. Secondary Clarifier Modeling: A Multi-Process Approach: PhD Thesis. New Orleans: University of New Orleans, 2004. 440 p.

74. Goula A. M., Kostoglou M., Karapantsios T. D., Zouboulis A. I. A CFD methodology for the design of sedimentation tanks in potable water treatment: Case study: The influence of a feed flow control baffle. *Chem. Eng. J.* 2008, 140, 110–121. [Google Scholar] [CrossRef].

75. Gresch M., Armbruster M., Braun D., Gujer W. (2011). Effects of aeration patterns on the flow field in wastewater aeration tanks. *Water Research.* 45(2), 810–818. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2010.09.009>

76. Gu Y., Li Y., Yuan F., Yang Q. Optimization and control strategies of aeration in WWTPs: A review. *J. Clean. Prod.* 2023. 418, 138008. [Google Scholar] [CrossRef].

77. Henze M., Gujer W., Mino T., van Loosdrecht M. Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3; IWA Publishing: London, UK, 2015. [Google Scholar].

78. Herman Helnes. Biological phosphorous removal in a moving bed biofilm reactor/ Doctoral Thesis, Trondheim, Norwegian University, 2007. 138 p.

79. Holenda B. Development of modeling, control and optimization tools for the activated sludge process: PhD Thesis. Chemical Engineering University of Pannonia, 2007. 155 p.

80. Hruzdieva O.V., Pozdniakova U.O., Holub V.V. (2024). Evaluation of the efficiency of disinfection process of drinking water with chlorine compounds in urban water supply. *Journal of Chemistry and Technologies*, 32 (1), pp. 171-182. DOI: 10.15421/jchemtech.v32i1.291574

81. Husham T. Ibrahim, He Qiang, Wisam S. Al-Recabi, Yang Qiqi. Improvements in Biofilm Processes for Wastewater Treatment/ *Pakistan Journal of Nutrition* 11(8). 2012. Pp. 708 – 734.

82. Hussain, K., Khan, N. A., Vambol, V., Vambol, S., Yeremenko, S., & Sydorenko, V. Advancement in Ozone base wastewater treatment technologies: Brief review. *Ecological Questions*, 2022. 33, 2, pp. 1–23. (Scopus, Poland). <https://doi.org/10.12775/eq.2022.010>
83. Ishii. Drag Coefficient and Relative Velocity in Bubbly, Droplet or Particulate Flows, *AIChE J.* № 25. P. 843. DOI: 10.1002/aic.690250513
84. Karol Trojanowicz, Włodzimierz Wójcik . Dimensioning of aerated submerged fixed bed biofilm reactors based on a mathematical biofilm model applied to petrochemical wastewater – the link between theory and practice/<http://dx.doi.org/10.4314/wsa.v40i2.14>, Available on website <http://www.wrc.org.za>
85. Karpinska A. M. et al. CFD-aided modelling of activated sludge systems – a critical review *Water Res.* 2016.
86. Karpinska A. M. CFD as a tool to optimize aeration tank design and operation, *J. Environ. Eng.* № 144. P. 05017008. DOI: 10.1061/(ASCE)EE.1943-7870.0001307
87. Karpinska A. M. CFD-aided modelling of activated sludge systems – A critical review, *Water Res.* № 88. P. 861. DOI: 10.1016/j.watres.2015.11.008
88. Kleine D., Reddy B. Finite Element Analysis of Flows in Secondary Settling Tanks/ *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. USA: John Wiley & Sons Ltd, 2005. Pp. 849-876.
89. Koltsova E., Smotraiev R., Nehrii A., Zhekeev M., Ratnaweera H. (2025). Mechanisms for removing phosphorus species through sequential coagulation using inorganic coagulants and organic polymers. *Water Science and Technology*, 91 (2), pp. 202 – 218. DOI: 10.2166/wst.2024.401
90. Kostoglou M., Karapantsios T. D., Matis K. A. CFD model for the design of large scale flotation tanks for water and wastewater treatment. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2007. 46, 6590–6599. [Google Scholar] [CrossRef]
91. Laurent J. A protocol for the use of computational fluid dynamics as a supportive tool for wastewater treatment plant modelling *Water Sci. Technol.* 2014.

92. Le Moullec Y. Activated sludge pilot plant: comparison between experimental and predicted concentration profiles using three different modelling approaches *Water Res.* 2011.

93. Le Moullec Y., Gentric C., Potier O., Leclerc J. P. (2010). CFD simulation of the hydrodynamics and reactions in an activated sludge channel reactor of wastewater treatment. *Chemical Engineering Science*, 65(1), P.P.492–498. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2009.03.021>

94. Lledo Prades Martell. Computational Fluid Dynamics Techniques for Fixed –Bed Biofilm Systems Modelling: Numerical Simulation and Experimental Characterization. Doctoral Thesis, Manresa, October 2018. 201 p.

95. Lima Neto I. E., Cardoso S. S. S., Woods A. W. On mixing a density interface by a bubble plume. *Journal of Fluid Mechanics*. 2016. V. 802. <https://doi.org/10.1017/jfm.2016.454>

96. Li-Ming Chen, Li-He Chai. Mathematical model and mechanisms for biofilm wastewater treatment/ *World Journal of Microbiology @Biolotechnology*, 2005, *World Journal of Microbiology and Biotechnology* 21(8): P.P. 1455 – 1460.

97. Lin K. F., Yang M. Experimental study on the sludge-water complete mixing in anaerobic-aerobic series process with TP as a tracer. *Technology of Water Treatment*. 2020. 46(10), 50–54.

98. Lizarralde, I.; Fernández-Arévalo, T.; Beltrán, S.; Ayesa, E.; Grau, P. Validation of a multi-phase plant-wide model for the description of the aeration process in a WWTP. *Water Res.* 2018, 129, 305–318 p.

99. Mannina G., Trapani D. Di, Torregrossa M., Viviani G. Modelling of hybrid moving bed biofilm reactors: a pilot plant experiment/ *Water Science @ Technologies*. Vol. 55. №8 -9. Pp. 237-246.

100. Meghdad Pirsahab, Mitra Mohammadi, Abdollahdargahi, Ali Almasi, Marzieh Naderi . Modeling and kinetic evaluation of intermittent aeration bioreactor with continuous flow in hospital wastewater treatment. *Journal of Chemical and Pharmaceutical Sciences*. 2016. 1 JCPS. Vol. 9. Is. 4.

101. Menter. Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. *AIAA J.* № 32. P. 1598. DOI: 10.2514/3.12149
102. Mocanu Catalina Raluca, Razvan Mihaillescu. Numerical Simulation of Wastewater Treatment Aeration Processes/ *U.P.B. Sci. Bull., Series D.* Vol. 74. Is. 2. 2012. Pp.191 – 198.
103. Modeling of moving biofilm reactor (MMBR) efficiency on hospital wastewater (HW) treatment: a comprehensive analysis on BOD and COD removal / Shokoohi R., *Int. J. Environ. Technol.* 2017. *Journal of Environmental* 14(4): P.P. 841 – 852.
104. Oxygen transfer prediction in aeration tanks using CFD. *Chemical Engineering Science*/ Y. Fayolle, A. Cockx, S. Gillot, M. Roustan, A. Héduit. 2007. 62(24). Pp. 7163–7171. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.08.082>
105. Pereda M., Zamarreno J. M. Agent – based modeling of an activated sludge process in batch reactor/ 19<sup>th</sup> Mediterranean Conference on Control and Automation Aquis , Corfu, Greece, June 20-23, 2011. Pp.1128 – 1133.
106. Performance, kinetic, and biodegradation pathway evaluation of anaerobic fixed film fixed bed reactor in removing phthalic acid esters from wastewater/ Ehsan Ahmadi, Samira Yousefzadeh, Mohsen Ansari, Hamid Reza, etc. *Scientific Reports*7(1):41020, 2017.. DOI: 10.1038/srep41020
107. Rafique L., Adna, A., Taha A., Ban, S., Vambol S., Mushtaq T., Ilyas N., Hussain S., Borysova L., Kovalov O. Application of copper and aluminium electrode in electro coagulation process for municipal wastewater treatment: A case study at Karachi. *Ecological Questions* .2022. 34, 1, pp. 99–107 (Scopus, Q4, Poland). <https://doi.org/10.12775/eq.2023.008>
108. Ramalingam K., Xanthos S., Gong M. Critical modeling parameters identified for 3D CFD modeling of rectangular final settling tanks for New York City wastewater treatment plants / *Water Science & Technology*. UK: Alliance House, 2012. Vol. 65(6). Pp. 1087-1094.

109. Ratkovich N. Understanding Hydrodynamics in Membrane Bioreactor Systems for Wastewater Treatment: Two-phase Empirical and Numerical Modelling and Experimental Validation. 2010. Ph.D. Thesis, Ghent University.
110. Robescu D., Mandiș C., Robesku D. Design Lamellar Secondary Settling Tank Using Numerical Modeling / U.P.B. Sci. Bull. București, 2010. Series D. Vol. 72. Is. 4. Pp. 211-216.
111. Robesku Diana, Robesku Dan, Mocanu Raluca, Moga Corina. Modeling of attached growth biological wastewater treatment process/ U.P.B.Sci. Bull. Series C. Vol. 64. №4. 2007. Pp. 593-598.
112. Rusten B., Odegaard H., Lundar A. Treatment of dairy wastewater in a novel moving bed biofilm reactor. Wat. Sci. Tech. Vol. 26. №. 3-4. 1992. Pp. 703 – 711.
113. Samstag R.W. CFD for wastewater treatment: an overview Water Sci. Technol. 2016.
114. 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. Pp. 392-396.
115. Sobremisana A. P., Ducoste J. J., de los Reyes F. L. Combining CFD, floc dynamics, and biological reaction kinetics to model carbon and nitrogen removal in an activated sludge system. In WEFTEC 2011; Water Environment Federation: Alexandria, VA, USA, 2011. Pp. 3272–3282. [Google Scholar]
116. Kuvendziev S., Lisichkov K., Dimitrovski D. Modeling of biological reactor for municipal wastewater treatment/ Zastita Materijala 52, 2011, broj 4. Pp. 291 – 297.
117. Takács I. A dynamic model of the clarification-thickening process/ Water Research. UK: Elsevier, 1991. Vol. 25(10). Pp. 1263-1271.
118. Tran Ha Quan, Gogina E., Tran Van Quang. The biological treatment of laboratory SBR model with biofilm/ MATEC Web of Conferencies 251, 03029. 2018. IPICSE. 7 p.

119. Validation of a multi-phase plant-wide model for the description of the aeration process in a WWTP. *Water Res/ I. Lizarralde, T. Fernández-Arévalo, S. Beltrán, E. Ayesa, P. Grau.* 2018. Pp. 129, 305–318. [Google Scholar] [CrossRef] [PubMed]

120. Vermande S., Essemiani K., Meinhold J., Traversay C. D., Fonande C. (2003, January 11–15). Trouble shooting of agitation in an oxidation ditch: Applicability of hydraulic modeling. Proceedings of the 76th Annual Technical Exhibition and Conference WEFTEC'03, Los Angeles, CA, USA. DOI: 10.2175/193864703784606837

121. Xie H. Simulation of flow field and sludge settling in a full-scale oxidation ditch by using a two-phase flow CFD model *Chem. Eng. Sci.* № 109. P. 296. DOI: 10.1016/j.ces.2014.02.002

122. Yang. Study on two operating conditions of a full-scale oxidation ditch for optimization of energy consumption and effluent quality by using CFD model, *Water Res.* № 45. P. 3439. DOI: 10.1016/j.watres.2011.04.007


123. Zheng Qiaogeng. Selection and Optimization of Carriers in Biological Wastewater Treatment / Thesis, Nanyang Technological University, 2005.140 p.

124. Evaluation of oxygen transfer parameters of fine-bubble aeration system in plug flow aeration tank of wastewater treatment plant/ X. Zhou, Y. Wu, H. Shi, Y. Song. *J. Environ. Sci.* 2013. *Journal of Environmental* 25(2), PP. 295–301.

## ДОДАТОК А

ЗАТВЕРДЖУЮ

Директор філії «Проектно-  
вишуквальний інститут  
залізничного транспорту»  
АТ «Укрзалізниця», д.т.н., доц.

  
Іван КАЛАШНІКОВ  
«20» \_\_\_\_\_ 2026 р.

## АКТ

про впровадження результатів дисертаційної роботи  
**Чіркова Антона Олексійовича**

Фахівцями Харківського відділення філії «Проектно-вишуквальний інститут залізничного транспорту» АТ «Укрзалізниця» - в.о. начальника відділення Шепеленко Сергієм Володимировичем та заступником начальника відділення, к.т.н., с.н.с. Божко Володимиром Вячеславовичем розглянуто матеріали дисертаційної роботи **Чіркова Антона Олексійовича** та зроблено висновок, що надані результати представляють практичну цінність та можливо практично використовувати наступні розробки:

- нові чисельні моделі для рішення практичних задач при розрахунку концентрації активного мулу, домішок та кисню в потоці стічних вод, що проходять обробку в аеротенку:

- розрахунок концентрації кисню здійснюється за допомогою рівняння першого порядку;
- розрахунок концентрації кисню здійснюється за допомогою рівняння масопереносу;

- комп'ютерні коди (на базі розроблених чисельних моделей), що дають можливість оцінювати ефективність біологічної очистки стічних вод на новому якісному рівні. Особливістю даних комп'ютерних кодів є швидкість розрахунку та можливість враховувати фактори, що не враховуються в існуючих методах розрахунків аеротенків.

Моделювання гідродинаміки стічних вод в аеротенку виконується за допомогою двовимірного та тривимірного рівняння для потенціалу швидкості. Моделювання концентрації активного мулу, домішок та кисню в аеротенку виконується за допомогою двовимірного та тривимірного рівняння масопереносу, що враховує поле швидкості потоку стічних вод в аеротенку,

процес дифузії. Побудова чисельних моделей гідродинаміки та масопереносу виконується за допомогою кінцево-різницевого схем.

Розроблені чисельні моделі та комп'ютерні коди можуть бути використано у філії «Проектно-вишукувальний інститут залізничного транспорту» АТ «Укрзалізниця» при виконанні робіт, які пов'язані з проектуванням систем очистки стічних вод підприємств АТ «Укрзалізниця».

За рахунок впровадження вищезазначених розробок очікується підвищення ефективності очищення стічних вод за мінімальних витрат при проектуванні очисних споруд підприємств АТ «Укрзалізниця».

В.о. начальника відділення  
(посада)



(підпис)

С.В. Шепеленко  
(ПІБ)

Заступник начальника  
відділення, к.т.н., с.н.с.  
(посада)



(підпис)

В.В. Божко  
(ПІБ)

## ДОДАТОК Б

Міністерство освіти і науки України  
Український державний університет науки і технологій

ЗАТВЕРДЖУЮ

Перший проректор

д.т.н., проф. Радкевич А. В.



## АКТ ВПРОВАДЖЕННЯ

результатів дисертаційної роботи Чіркова Антона Олексійовича  
у навчальний процес

Чинним актом підтверджується те, що результати дисертаційної роботи аспіранта кафедри «Гідравліка, водопостачання та фізика» Чіркова А. О. використовуються в навчальному процесі Українського державного університету науки і технологій при підготовці студентів, які навчаються за спеціальністю 192 «Будівництво та цивільна інженерія» (ОПП «Водопостачання та водовідведення»), 183 «Технології захисту навколишнього середовища» (ОПП «Захист довкілля та техногенна безпека»). Матеріали дисертаційної роботи, алгоритми та пакети програм використовуються при проведенні лекційних та практичних занять з дисциплін «Споруди і обладнання водовідведення», «Технології захисту від біогенного забруднення», що дозволило підвищити ефективність навчального процесу та якість викладання матеріалу при вивченні вказаних дисциплін.

Керівник навчального відділу



Світлана БОРИЧЕВА

Зав. каф. «Гідравліка, водопостачання  
та фізика» д.т.н., проф.



Микола БІЛЯЄВ