

5. Гавришин А.И. Оценка и контроль качества геохимической информации. -М.: Недра, 1980. – 287с.
6. Беус А.А. Геохимия литосферы. – М.: Недра, 1981. – 335с.
7. Ишков В.В., Сердюк Е.А., Слипенький Е.В. Особенности применения методов кластерного анализа для классификации угольных пластов по содержанию токсичных и потенциально токсичных элементов (на примере Красноармейского геолого-промышленного района) // Сб. науч. тр. НГУ. -2003. - №19, Т.1. - С. 5-16.
8. Червяков В.А. Концентрация поля в современной картографии. – М.: Наука, 1978. – 149 с.
9. Манская С.М., Дроздова Т.В. Геохимия органического вещества. М.: Наука, 1964. – 315 с.

*Рекомендовано до публікації д.г.-м.н. Нагорним В.М.
Надійшла до редакції 14.03.2012*

УДК 628.334.5:519.6

© Н. Н. Беляев, Е. К. Нагорная

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ И ПЕРЕНОСА ЗАГРЯЗНИТЕЛЯ В ВЕРТИКАЛЬНОМ ОТСТОЙНИКЕ

Представлены результаты численного моделирования массопереноса в вертикальном отстойнике.

Представлені результати чисельного моделювання масопереносу в вертикальному відстійнику.

The results of the numerical modeling of the mass transfer in the vertical settler are presented.

Введение. Одним из важных элементов в системах очистки воды являются отстойники и, в частности, вертикальные отстойники. В настоящее время, в Украине, для расчета этих очистных сооружений применяются модели (балансовые [1], регрессионные [2], одномерные кинематические [3,4]), которые не учитывают геометрическую форму отстойника и другие его конструктивные особенности. Поэтому использование таких моделей на практике ограничивает возможности инженеров при обосновании проектных параметров очистных сооружений. За рубежом для расчета отстойников, кроме балансовых, одномерных кинематических моделей, также используют 3D численные модели, в которых для расчета поля скорости в отстойнике применяются уравнения Навье-Стокса. Реализация этих CFD моделей требует применения очень мелкой сетки, а следовательно - больших временных затрат на получение результата. Кроме этого, стоимость 3D расчета очень велика - более 20 тысяч долларов [5]. Столь высокая стоимость расчета является причиной того, что за рубежом инженеры калибруют *одномерные* кинематические модели на 3D численных моделях, а потом эти одномерные модели используют при серийных расчетах, чтобы снизить стоимость проекта. В Украине многомерные CFD модели для расчета вертикальных отстойников – не разрабатываются. Поэтому, актуальной проблемой является разработка эффективных методов расчета вертикальных отстойников, основанных на применении 3D CFD моделей и позволяющих оперативно, с ма-

лыми финансовыми затратами, рассчитывать данные сооружения, имеющие сложную геометрическую форму.

Целью данной работы является создание 3D численной модели процесса очистки воды в вертикальном отстойнике, позволяющей учитывать при моделировании его геометрическую форму [6,7].

Математическая модель массопереноса в отстойнике. Процесс переноса загрязнителя в вертикальном отстойнике рассчитывается на базе уравнения [8]

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial (w-w_s)C}{\partial z} + \sigma C = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right), \quad (1)$$

где C – концентрация загрязнителя в воде; u, v, w – компоненты вектора скорости течения; μ_x, μ_y, μ_z – коэффициенты диффузии; t – время; w_s – скорость оседания загрязнителя; σ – коэффициент, учитывающий процессы биохимического окисления и т. п. в отстойнике.

Краевые условия для уравнения переноса. На твердых поверхностях (стенки отстойника и т.п.) реализуется граничное условие вида

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

где n – единичный вектор внешней нормали к твердой поверхности.

На твердых горизонтальных поверхностях отстойника в численной модели реализуется граничное условие «поглощения» загрязнителя. На входной границе (граница входа потока сточных вод в отстойник) ставится условие:

$$C|_{\text{граница}} = C_E,$$

где C_E – известное значение концентрации загрязнителя.

На выходной границе расчетной области, в численной модели ставится «циклическое» (мягкое) граничное условие вида

$$C(i+1, j, k) = C(i, j, k),$$

где i, j, k – номер разностной ячейки.

В начальный момент времени полагается $C = 0$ в расчетной области. Задача распространения загрязнителя в отстойнике решается на установление решения.

Модель гидродинамики. Для практического применения уравнения (1) необходимо знать поле скорости потока в отстойнике. Для расчета этого поля скорости применяется 3D модель потенциального течения. В этом случае моделирующее уравнение имеет вид [9]

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

где P – потенциал скорости.

Для уравнения (2) ставятся следующие граничные условия [9]:

- на твердых стенках отстойника, перегородках внутри него: $\frac{\partial P}{\partial n} = 0$, где

n - единичный вектор внешней нормали к твердой границе;

- на входной границе (область втекания сточных вод в отстойник):

$\frac{\partial P}{\partial n} = V_n$, где V_n - известное значение скорости втекания;

-на выходной границе расчетной области (область выхода осветленных вод из отстойника) $P = P * (x = const, y) + const$ (условие Дирихле).

После расчета поля потенциала скорости осуществляется расчет компонент вектора скорости потока сточных вод на базе зависимостей [3]

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

Численный метод решения . Для численного интегрирования уравнения переноса загрязнителя в отстойнике применяется неявная попеременно – треугольная разностная схема расщепления [10,11]. Численный расчет реализуется на прямоугольной разностной сетке Для численного интегрирования уравнения для потенциала скорости (2) используется метод Либмана [12].

Особенностью рассматриваемой задачи является то, что численное интегрирование уравнений модели проводится в области , имеющей сложную геометрическую форму (рис.1). Для формирования геометрической формы отстойника в численной модели на прямоугольной разностной сетке, используется метода маркирования [10]. С помощью метода маркирования пользователь может быстро, в файле исходных данных, сформировать геометрическую форму отстойника.

Практическая реализация модели. На основе разработанной численной модели разработан специализированный код «Settler-3D». Для программирования использовался *FORTRAN*.

Разработанная численная модель была использована для моделирования процесса массопереноса в модифицированном вертикальном отстойнике с перегородкой [1] (рис. 1). *Цель вычислительного эксперимента* – оценка эффективности очистки воды в отстойнике рассматриваемого типа при различной скорости биохимического окисления в отстойнике. Скорость биохимического окисления определяется величиной параметра σ в модели (1).

Вычислительный эксперимент проводился при таких параметрах: скорость потока на входе в отстойник 12 м / ч; коэффициент диффузии по всем координатным направлениям – 0,7 м² / ч; $w_s = 0,8$ м / ч. При проведении вычислительного эксперимента варьируется величина параметра σ . Концентрация загрязнителя во входящем в отстойник потоке равна 100 ед. (в безразмерном виде). Расчет выполняется для отстойников двух различных размеров.

Задача 1. Отстойник средних размеров. В данном случае длина отстойника – 8 м; ширина – 6,6 м; глубина - 3,34 м. Длина перегородки – 1,66 м.

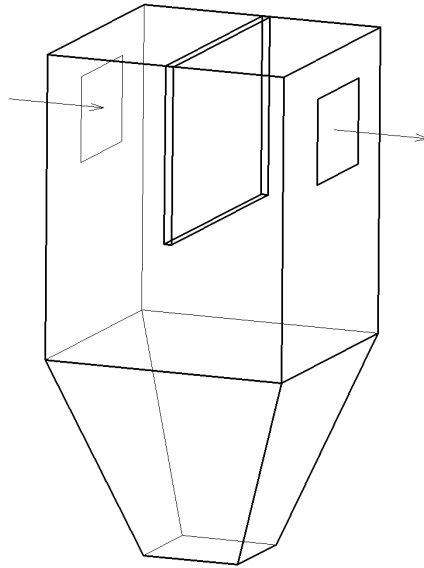


Рис.1. Схема модифицированного вертикального отстойника с перегородкой

Рассмотрим результаты вычислительного эксперимента. На рис. 2 представлено распределение значения концентрации загрязнителя в отстойнике (вид сбоку) в сечении $y=2,97$ м. На данном рисунке стрелками показано, где происходит вход и выход воды из сооружения. Хорошо видно, что распределение концентрации загрязнителя в отстойнике - неравномерное: основная масса загрязнителя «сконцентрирована» в нисходящей части отстойника, а в восходящем потоке, концентрация загрязнителя значительно меньше (здесь зона загрязнения в этой части отстойника более «разреженная»).

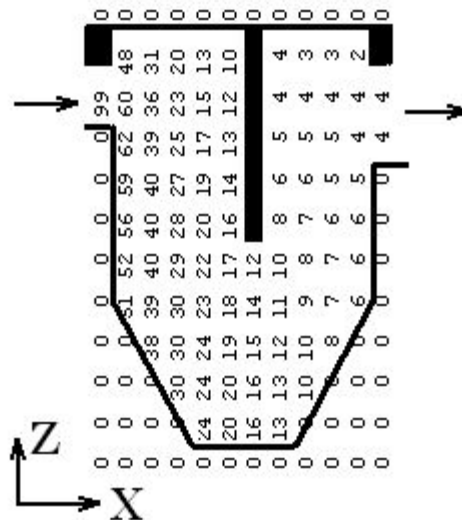


Рис.2. Распределение концентрации загрязнителя в вертикальном отстойнике с перегородкой, скорость биохимического окисления $\sigma = 0$ (вид сбоку, сечение $y=2,97$ м, $w_s=0,8$ м / ч максимальная концентрация в сечении равна 100ед.)

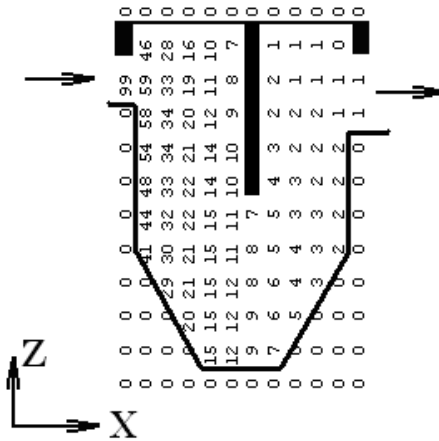


Рис. 3. Распределение концентрации загрязнителя в вертикальном отстойнике с перегородкой, скорость биохимического окисления $\sigma = 0,2$ [1/час] (вид сбоку, сечение $y = 2,97$ м, $w_s = 0,8$ м / ч, максимальная концентрация в сечении равна 100ед.)

На данном рисунке и на рис.3 значение концентрации представлено в безразмерном виде: каждое число – это величина концентрации в процентах от величины максимальной концентрации в данном сечении. Поэтому, под каждым рисунком дана информация о величине этой максимальной концентрации для данного сечения. Такое представление результатов вычислительного эксперимента дает возможность быстро анализировать информацию по оценке величины концентрации в любой зоне сооружения. Необходимо отметить, что вывод на печать результатов расчета осуществляется по формату печати «целых» чисел, т.е. дробная часть числа не выдается на печать. Это значит, что если, например, в какой-то точке расчетное значение концентрации составляет «2,34 %» от концентрации на входе в отстойник, то на печать будет выведено число «2». Данный подход к такому выводу результатов на «печать» эффективен при проведении серийных расчетов, когда осуществляется «перебор» различных вариантов с целью выбора наиболее оптимальной конструкции сооружения. Для детального анализа данных расчета разработанный код выдает значение концентрации по формату «действительных» чисел, т.е. с сохранением величины дробной части числа.

На рис.3 представлено распределение концентрации загрязнителя в отстойнике для варианта, когда скорость биохимического окисления равна $\sigma = 0,2$ [1/час]. Сравнивая рис.2 и рис.3 видим, что концентрация загрязнителя на выходе из сооружения снизилась за счет протекания биохимических реакций в отстойнике. Снижение концентрации происходит и в различных зонах отстойника. Так, например, непосредственно под перегородкой концентрация загрязнителя составляет примерно 12 % для случая $\sigma = 0$ (рис. 2) и примерно 7 % для случая $\sigma = 0,2$ [1/час] (рис. 3).

На основе проведенного вычислительного эксперимента определена эффективность работы отстойника при различной величине скорости протекания биохимических реакций в сооружении. Эффективность очистки оценивалась по

величине концентрации загрязнителя на выходе из отстойника. Значение этой концентрации представлено в табл.1.

Таблица 1.

Значение концентрации загрязнителя на выходе из отстойника при различной величине скорости биохимического окисления в сооружении (скорость гравитационного оседания загрязнителя - $w_s=0,8$ м/ч)

Коэффициент скорости биохимических реакций в отстойнике	Концентрация загрязнителя на выходе из отстойника (в процентах от входной концентрации)
$\sigma=0$ [1/час]	$C=4-5\%$
$\sigma=0,1$ [1/час]	$C=2-3\%$
$\sigma=0,2$ [1/час]	$C=1,6-1,9\%$
$\sigma=0,4$ [1/час]	$C=0,7-0,9\%$
$\sigma=0,6$ [1/час]	$C=0,3-0,4\%$
$\sigma=3,5$ [1/час]	$C=0$

Анализ данных из табл. 1 показывает, что с увеличением значения параметра σ происходит снижение концентрации загрязнителя на выходе из сооружения, т.е. эффективность очистки повышается.

В табл.2 представлены данные по оценке эффективности очистки воды в отстойнике при другом значении скорости гравитационного оседания загрязнителя - $w_s=0,01$ м / ч, т. е. при существенно меньшей скорости (это скорость оседания «micro flocks»).

Таблица 2.

Значение концентрации загрязнителя на выходе из отстойника при различной величине скорости биохимического окисления в сооружении (скорость гравитационного оседания загрязнителя - $w_s=0,01$ м/ч)

Коэффициент скорости биохимических реакций в отстойнике	Концентрация загрязнителя на выходе из отстойника (в процентах от входной концентрации)
$\sigma=0$ [1/час]	$C=49\%$
$\sigma=0,2$ [1/час]	$C=11-12\%$
$\sigma=0,6$ [1/час]	$C=1,4-1,5\%$

Из табл. 2 видно, что, при столь малой скорости гравитационного оседания загрязнителя и при отсутствии биохимических реакций, эффективность очистки для данного отстойника резко снизилась: концентрация загрязнителя на выходе из сооружения составляет величину порядка 49 % от входной концентрации. Но чем выше скорость биохимических реакций, тем существенно выше эффективность работы очистного сооружения.

Задача 2. Малый отстойник. В данном случае длина отстойника – 3 м; ширина – 2,5 м; глубина - 2,5 м. Длина перегородки – 1,25 м.

На рис.4 представлено распределение концентрации загрязнителя в отстойнике для варианта, когда скорость биохимического окисления равна $\sigma=0$ [1/час], $w_s=0,8$ м / ч. Сравнивая рис.2 и рис.4 видим, что концентрация загрязнителя на выходе из данного сооружения составляет величину порядка 14 - 16%, против 4 - 5% для отстойника средней величины. Таким образом, уменьшение габаритов отстойника, при неизменном значении других параметров, привело к ухудшению очистки. Как видно из рис. 4 распределение концентрации внутри сооружения стало более равномерным, что свидетельствует о снижении качества очистки.

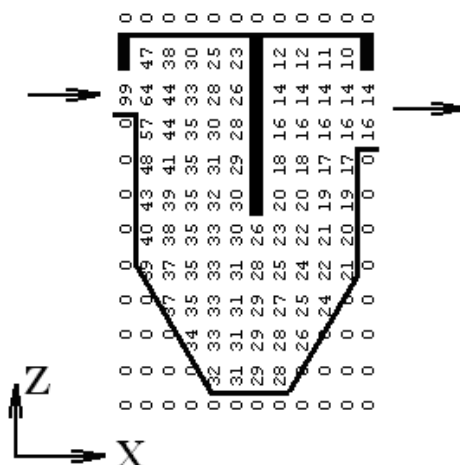


Рис. 4. Распределение концентрации загрязнителя в малом вертикальном отстойнике с перегородкой, скорость биохимического окисления $\sigma=0$ (вид сбоку, сечение $y=1,12$ м, $w_s=0,8$ м / ч максимальная концентрация в сечении равна 100ед.)

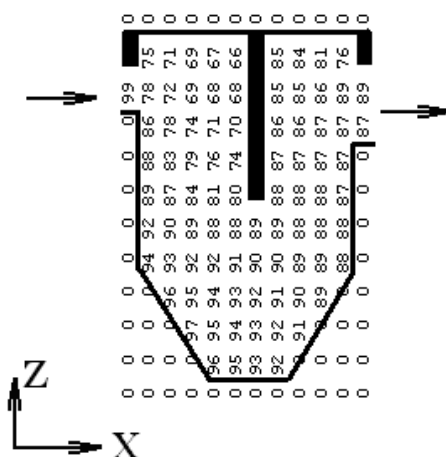


Рис.5. Распределение концентрации загрязнителя в малом вертикальном отстойнике с перегородкой, скорость биохимического окисления $\sigma=0$, $w_s=0,01$ м / ч (вид сбоку, сечение $y=1,12$ м, максимальная концентрация в сечении равна 100ед.)

На последующих рисунках представлено распределение концентрации загрязнителя в малом отстойнике при транспорте микрохлопьев (скорость гравитационного оседания их $w_s=0,01$ м / ч). На рис. 5 представлены данные для случая, когда $\sigma = 0$, а на рис. 6,7 – для сценария, когда есть биохимическое окисление внутри отстойника. Как показали расчеты, при значении $\sigma = 0$ концентрация загрязнителя на выходе из малого отстойника составит 87 – 89 %, при $\sigma = 0,1$ [1/ч] концентрация на выходе составляет примерно 54 %, при значении $\sigma = 0,4$ [1/ч] концентрация на выходе составляет примерно 18 %.

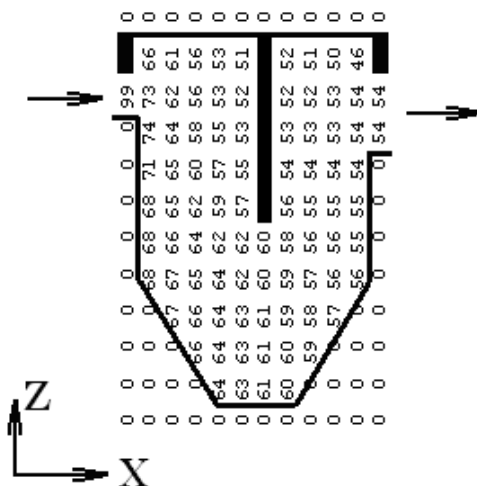


Рис.6. Распределение концентрации загрязнителя в малом вертикальном отстойнике с перегородкой, скорость биохимического окисления $\sigma = 0,1$ [1/ч], $w_s=0,01$ м / ч (вид сбоку, сечение $y=1,12$ м, максимальная концентрация в сечении равна 100ед.)

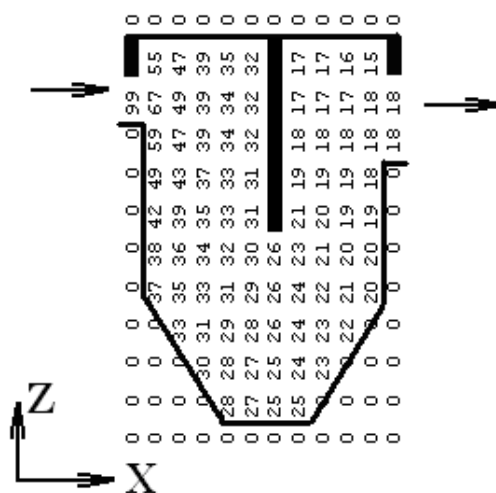


Рис.7. Распределение концентрации загрязнителя в малом вертикальном отстойнике с перегородкой, скорость биохимического $\sigma = 0,4$ [1/ч], $w_s=0,01$ м / ч (вид сбоку, сечение $y=1,12$ м, максимальная концентрация в сечении равна 100ед.)

В заключение отметим, что для расчета одного варианта задачи потребовалось порядка 2 мин. компьютерного времени. Такие минимальные затраты време-

ни на проведение вычислительного эксперимента являются важным обстоятельством при проведении проектировщиками серийных расчетов на практике.

Выводы. В работе представлена 3D численная модель работы вертикального отстойника. В основу модели положено уравнение переноса загрязнителя и модель потенциального течения. На базе разработанной численной модели создан код, который позволяет оперативно рассчитать эффективность работы очистного сооружения в трехмерной постановке. Для расчета процесса массопереноса в отстойнике на базе построенной численной модели требуется несколько минут компьютерного времени. Разработанный код позволит проектировщикам быстро оценивать эффективность очистки воды на этапе обоснования проектных параметров очистного сооружения. Дальнейшее направление данной работы следует проводить в направлении разработки модели процесса массопереноса в отстойниках на базе модели отрывных вихревых течений идеальной жидкости.

Список литературы

1. Таварткиладзе И.М. Математическая модель расчета вертикальных отстойников с перегородкой [Текст] / И.М. Таварткиладзе, А. М. Кравчук, О. М. Нечипор // Водоснабжение и санитарная техника. – Вып. № 1. – 2006. – Ч. 2. – С. 39-42.
2. Токарь И.Я. К расчету вертикальных отстойников водоочистных сооружений [Текст] / И.Я. Токарь, Сухоруков Г. И., Сухоруков Д. Г. // Науковий вісник будівництва. - № 59, 2010. – С. 293 – 296.
3. Олейник А.Я. Теоретический анализ процессов осаждения в системах биологической очистки сточных вод [Текст] / А. Я. Олейник, Ю. И. Калугин, Н. Г. Степовая, С. М. Зябликов // Прикладная гидромеханика. – Том 6 (78). – № 4. -2004. - С. 62-67.
4. Степова Н.Г. До розрахунку вертикального відстійника з урахуванням форми його нижньої частини [Текст] / Н. Г. Степова, Ю. І. Калугін Ю.І., О. Я. Олійник // Проблеми водопостачання, водовідведення та гідравлики. - Вип. № 14. - 2010. - С.145 -151.
5. Andrew Shaw et al// Optimizing energy dissipating inlet (EDI) design in clarifiers using an innovative CFD tool // 2005 Water Environment Federation
6. Беляев Н.Н. Математическое моделирование работы канализационного отстойника / Н.Н. Беляев, Е.К. Нагорная // Проблемы и перспективы развития железнодорожного транспорта: 72 міжн. наук.-практ. конф., 19-20 квітня 2012 р.: тези доп. – Дніпропетровськ, 2012. – С. 209-210.
7. Беляев Н.Н. Численная модель работы вертикального отстойника / Н. Н. Беляев, Е. К. Нагорная // Современные информационные технологии на транспорте, в промышленности и образовании: межд. научн.-практ. конф., 5-6 квітня 2012 р.: тезисы докл. – Днепропетровск, 2012. – С. 56.
8. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды [Текст] / Г. И. Марчук. – М.: Наука, 1982. – 320 с.
9. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа [Текст] / Л. Г. Лойцянский. - М. : Наука, 1978. – 735 с.
10. Згуровский М.З. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде [Текст] / М. З. Згуровский, В. В. Скопецкий, В. К. Хрущ, Н. Н. Беляев. – К. : Наук. думка, 1997. – 368 с.
11. Беляев Н.Н., Коренюк Е.Д., Хрущ В.К. Компьютерное моделирование динамики движения и загрязнения подземных вод.-Днепропетровск: Наука и образование, 2001.-156 с.
12. Самарский А. А. Теория разностных схем [Текст] / А. А. Самарский. - М. : Наука, 1983. – 616 с.

*Рекомендовано до публікації д.т.н. Зберовським О.В.
Надійшла до редакції 20.04.2012*