

## КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ РОЗБАВЛЕННЯ СТИЧНИХ ВОД У РІЧКАХ COMPUTER SIMULATION OF WASTEWATER DILUTION PROCESS IN RIVERS



**Хрутьба Вікторія Олександрівна**, доктор технічних наук, доцент, Національний транспортний університет, завідувач кафедри екології та безпеки життєдіяльності, e-mail: [viktorii.khrutba@gmail.com](mailto:viktorii.khrutba@gmail.com), тел.+380442885100, Україна, 01010, м. Київ, вул. М. Омеляновича-Павленка, 1, к. 312.

[orcid.org/0000-0002-8121-2042](https://orcid.org/0000-0002-8121-2042)



**Артеменко Владислав Андрійович**, Український гідрометеорологічний інститут Державної служби України з надзвичайних ситуацій та Національної академії наук України, науковий співробітник відділу гідрохімії, e-mail: [artemenko@uhmi.org.ua](mailto:artemenko@uhmi.org.ua), тел.. 380936011250, Україна, 03028, м. Київ, просп. Науки 37, к.34.



**Петрович Володимир Васильович**, кандидат технічних наук, професор, старший науковий співробітник, професор кафедри транспортного будівництва та управління майном Національного транспортного університету. e-mail: [petrovichvv60@ukr.net](mailto:petrovichvv60@ukr.net), тел. +380442807338, Україна, 01010, м. Київ, вул. М. Омеляновича-Павленка, 1, к. 138.,

<https://orcid.org/0000-0003-0422-2535>



**Лукьянова Віталіна Віталіївна**, кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри екології та безпеки життєдіяльності, Національний транспортний університет, e-mail: [vitalina\\_lk@i.ua](mailto:vitalina_lk@i.ua), тел.+380677985533, Україна, 01010, м. Київ, вул. М. Омеляновича-Павленка, 1, к. 312.

[orcid.org/0000-0001-8964-3560](https://orcid.org/0000-0001-8964-3560)

**Анотація.** За допомогою метода комп'ютерного моделювання досліджувався процес розбавлення стічних вод у річках.

Виявлена можливість різної якісної поведінки показника величини біохімічного споживання кисню (BOD) в залежності від величини витрат чистої річкової води.

**Введение.** В настоящее время при очистке сточных вод, попадающих в реку, обычно используется самоочищающая способность водоёмов [1].

Для решения комплекса задач, связанных с разбавлением сточных вод, необходимо знание основных процессов, происходящих в водной среде (гидродинамических, гидрохимических и гидробиологических).

Анализ таких процессов обычно проводится с использованием методов компьютерного моделирования [2,3].

Учитывая, что стремление к максимальной детализации модели часто приводит к её ухудшению, авторы использовали достаточно простую модель процесса.

Целью работы является анализ новых явлений, возникающих при значительном возрастании расходов чистой речной воды в процессе разбавления сточных вод.

**Общие положения.** В [4] была приведена простая математическая модель процесса сброса сточных вод в реку. Модель представляла собой проточный реактор идеального перемешивания.

На основе этой модели в [5] рассматривался участок реки, в котором учитывалось влияние очистного сооружения на экологическое состояние речной воды.

Идеализация процесса состояла в том, что “идеальное смешение” происходит в точке, где сточные воды непосредственно попадают в чистую речную воду.

При этом моделировалась динамика изменения концентраций растворённого кислорода, нитрат – ионов и биохимического потребления кислорода при различных значениях параметров модели с течением времени.

Однако наиболее важным для практики оказывается процесс изменения концентрации веществ по течению реки (т.е. ниже сброса сточных вод), особенно при резком возрастании расхода чистой воды (см. рис. 1).

Как известно, резкое возрастание расхода чистой речной воды может иметь место при различных нештатных ситуациях (например, при аварийном сбросе воды или в других подобных случаях).

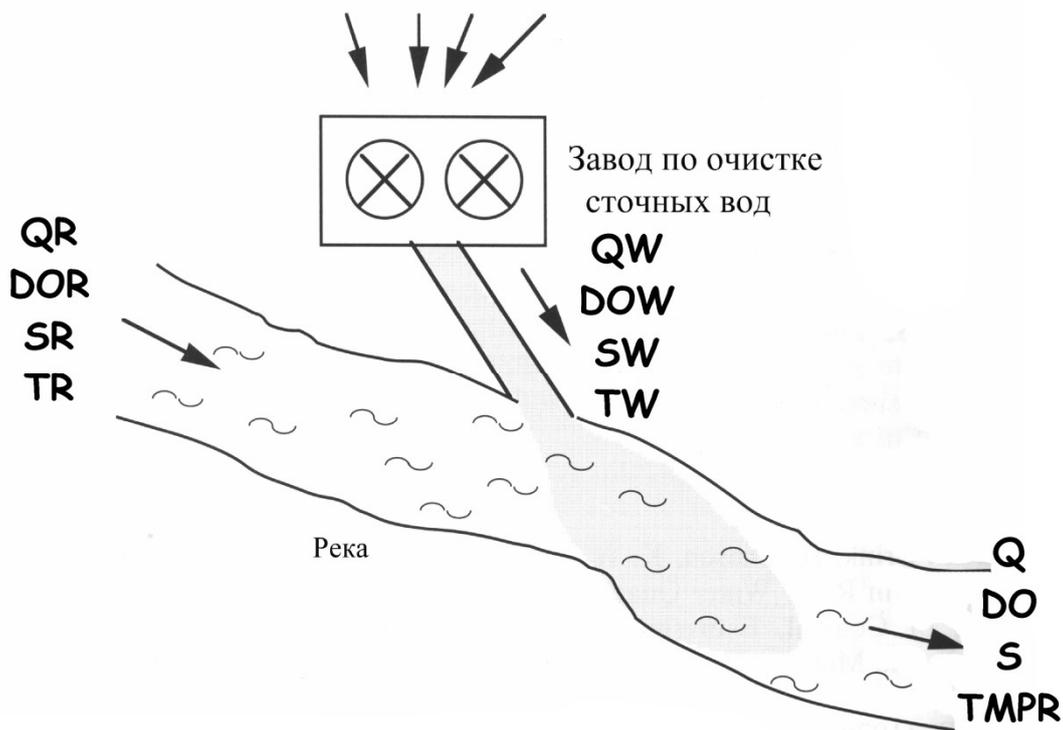


Рисунок – 1 Сброс сточных вод в реку

Figure – 1 Wastewater discharge into the river

Авторы исходили из предположения, что при нештатных и аварийных ситуациях будет резко возрастать лишь расход чистой воды. При этом температура и концентрация веществ в чистой речной воде практически изменяться не будут. То есть моделирование проводилось при различных значениях величины расхода чистой речной воды QR.

Далее смесь сточных и чистых вод движется по течению вниз и вследствие конечности скоростей химических реакций концентрация веществ в реке постепенно меняется.

### Алгоритм моделирования процесса сброса сточных вод в реку.

Как известно, при численном моделировании всем переменным перед их использованием (в выражениях) следует задать конкретные значения.

В ходе моделирования были использованы обозначения (имена) переменных и, соответственно, начальные значения (по умолчанию) согласно [4]:

1 : Для чистой воды реки :

$QR = 1900 \text{ м}^3/\text{час}$  (расход воды);

$DOR = 8 \text{ мг/л}$  (концентрация растворённого кислорода в речной воде);

$TR = 22^\circ\text{C}$  (температура речной воды);

$NR = 0.1 \text{ мг/л}$  (концентрация нитрат – ионов в речной воде);

$SR = 3 \text{ мг/л}$  (биохимическое потребление кислорода для речной воды);

$B = 1 \text{ м}$  (ширина реки);

$D = 2.5 \text{ м}$  (глубина реки).

2 : Для сточной воды :

$QW = 500 \text{ м}^3/\text{час}$  (расход сточной воды);

$DOW = 2 \text{ мг/л}$  (концентрация растворённого кислорода в сточной воде);

$TW = 25^\circ\text{C}$  (температура сточной воды);

$NW = 10 \text{ мг/л}$  (концентрация нитрат – ионов в сточной воде);

$SW = 40 \text{ мг/л}$  (биохимическое потребление кислорода для сточной воды).

3 : Константы химических реакций :

$KS20 = 0.01 \text{ 1/час}$  (константа скорости биodeградации, приведенная для температуры  $20^\circ\text{C}$ );

$KN20 = 0.005 \text{ 1/час}$  (константа скорости нитрификации, приведенная для температуры  $20^\circ\text{C}$ );

$A = 4.3$  (безразмерная величина, стехиометрический коэффициент для реакции нитрификации).

После задания всех необходимых значений переменных переходим непосредственно к расчётам согласно приведенному в [4] алгоритму.

1) Находим общий баланс для объёмного расхода воды :

$$Q = QR + QW; \quad (1)$$

2) Находим концентрацию растворённого кислорода после осуществления процесса смешивания чистой речной и сточной воды :

$$DO = \frac{(DOR * QR + DOW * QW)}{Q}; \quad (2)$$

3) Находим величину биохимического потребления кислорода BOD после осуществления процесса смешивания чистой речной и сточной воды :

$$BOD = S = \frac{(SR * QR + SW * QW)}{Q}; \quad (3)$$

4) Находим температуру воды после осуществления процесса смешивания чистой речной и сточной воды :

$$TMPR = \frac{(TR * QR + TW * QW)}{Q}; \quad (4)$$

5) Находим концентрацию нитрат - ионов после осуществления процесса смешивания чистой речной и сточной воды :

$$N = \frac{(NR * QR + NW * QW)}{Q}; \quad (5)$$

6) Находим величину насыщенную концентрацию растворённого кислорода :

$$DOSAT = 14.652 - 0.41 * TMPR + 0.008 * (TMPR)^2; \quad (6)$$

7) Находим линейную скорость потока воды в реке после осуществления процесса смешивания чистой речной и сточной воды:

$$V = \frac{Q}{(3600 * D * B)}; \quad (7)$$

Размерность в данном случае выражается в м/с (а не в м/час).

8) Находим константу скорости нитрификации для температуры TMPR :

$$KN = KN20 * 1.07^{(TMPR-20)}; \quad (8)$$

9) Находим константу скорости биодеградации для температуры TMPR :

$$KS = KS20 * 1.05^{(TMPR-20)}; \quad (9)$$

10) Находим константу скорости реазрации для температуры 20°C :

$$KA20 = 2.26 * V * D^{-0.667}; \quad (10)$$

11) Находим константу скорости реазрации для температуры TMPR :

$$KA = \left(\frac{KA20}{24}\right) * EXP(0.024 * (TMPR - 20)); \quad (11)$$

12) Находим дефицит растворённого кислорода E (разницу между насыщенной и фактической концентрациями растворённого кислорода):

$$E = DOSAT - DO. \quad (12)$$

### Модель процесса.

Поскольку все предварительные расчёты выполнены, приступаем далее к процессу моделирования.

Модель построена с учётом следующих положений :

А) Кислород потребляется микроорганизмами и попадает в реку в результате предварительной аэрации поверхности.

В) Скорость нитрификации и биохимического потребления кислорода вычисляется на основе предположения о первом порядке этих реакций.

С) Константы скоростей реакций KN и KS зависят от температуры. Константа скорости реазрации зависит от скорости потока воды и температуры TMPR.

13) Модель представляет собой систему из трёх линейных дифференциальных уравнений [4] :

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= A * KN * N + KS * S - KA * E, \\ \frac{dN}{dt} &= -KN * N, \\ \frac{dS}{dt} &= -KS * S. \end{aligned} \quad (13)$$

14) Соответственно, вектор (трёхмерный) начальных условий для решения системы (13) имеет вид :

$$\begin{bmatrix} E \\ N \\ S \end{bmatrix} \quad (14)$$

Решая систему дифференциальных уравнений (13) с начальными условиями (14), получаем в результате функции времени : E(t); N(t); S(t).

Но нас интересует величина DO(t), а не E(t).

Поэтому следует после решения (13) с начальными условиями (14) перейти от функции E(t) непосредственно к функции DO(t), используя очевидное соотношение:

$$DO(t) = DOSAT - E(t). \quad (15)$$

15) Окончательно следует оценить, как меняются не функции времени, а функции расстояния, то есть найти изменение концентрации веществ по длине реки в зависимости от места смешения чистой речной и сточной воды.

Обозначим такое расстояние как  $Z$ .

Таким образом, следует построить не графики  $DO(t)$ ,  $N(t)$  и  $S(t) = BOD(t)$ , а графики  $DO(Z)$ ,  $N(Z)$  и  $S(Z) = BOD(Z)$ .

16) Находим величину (вектор)  $Z$  :

$$Z = 3.6 * V * T. \quad (16)$$

Заметим, что в данном случае  $T$  – вектор времени, который получают при решении системы дифференциальных уравнений (13) с начальными условиями (14) численным методом.

Значение  $V$ , м/с, мы нашли ранее (см. уравнение (7)).

Таким образом, в данном случае имеем дело с достаточно простой моделью процесса (биотическое производство кислорода непосредственно не учитывается).

Тем не менее, как будет показано ниже, даже такая модель оказывается весьма полезной для практики.

### **Особенности проведения вычислений.**

Для численного решения системы из трёх линейных дифференциальных уравнений в [5] использовалась система MATHCAD.

Строго говоря, система MATHCAD в полной мере не является системой компьютерной математики.

Это, скорее всего, редактор математических формул.

MATHCAD не предназначен для работы в режиме “командной строки”, что, по сути, делает его непригодным для целей математического моделирования различных природных процессов и явлений.

Анализ литературы по математическому моделированию в экологии показал, что наиболее часто применяются системы MAPLE, MATLAB, R и PYTHON, которые позволяют решать задачи как в численном, так и символьном виде.

Специалисты по численным методам в области экологии обычно выбирают одну из систем, позволяющую работать в режиме “командной строки”, а также загружать собственные процедуры, записанные в отдельном текстовом файле.

В данном случае был использован язык программирования MATLAB, который используют такие системы компьютерной математики как MATLAB, FREEMAT и OCTAVE.

Программы написаны таким образом, чтобы код работал также в бесплатной системе FREEMAT (использовалась версия 4.2 или 4200).

Несмотря на то, что FREEMAT имеет решатель системы ДУ, тем не менее был использован разработанный авторами собственный оригинальный решатель.

Поскольку по умолчанию функция  $plot()$  системы FREEMAT производила не очень представительные графики, была специально написана функция  $PLOT2D02()$ , позволяющая создавать более совершенные графики.

### **Анализ результатов.**

Процесс моделирования начали со значения  $QR = 1500$ , а закончили значением  $QR = 5000$ .

Таким образом, был использован шаг в приращении значений  $QR$ , равный 500.

Далее строили графики  $DO(Z)$  (концентрация растворённого кислорода),  $N(Z)$  (концентрация нитрат - ионов) и  $S(Z) = BOD(Z)$  (величина биохимического потребления кислорода).

Всего было построено 24 графика, что позволило исследовать поведение модели при указанном выше наборе параметров.

Некоторые результаты моделирования количества растворённого кислорода в зависимости от расхода чистой речной воды  $QR$  по длине (течению) реки представлены на рис. 2 и рис. 3.

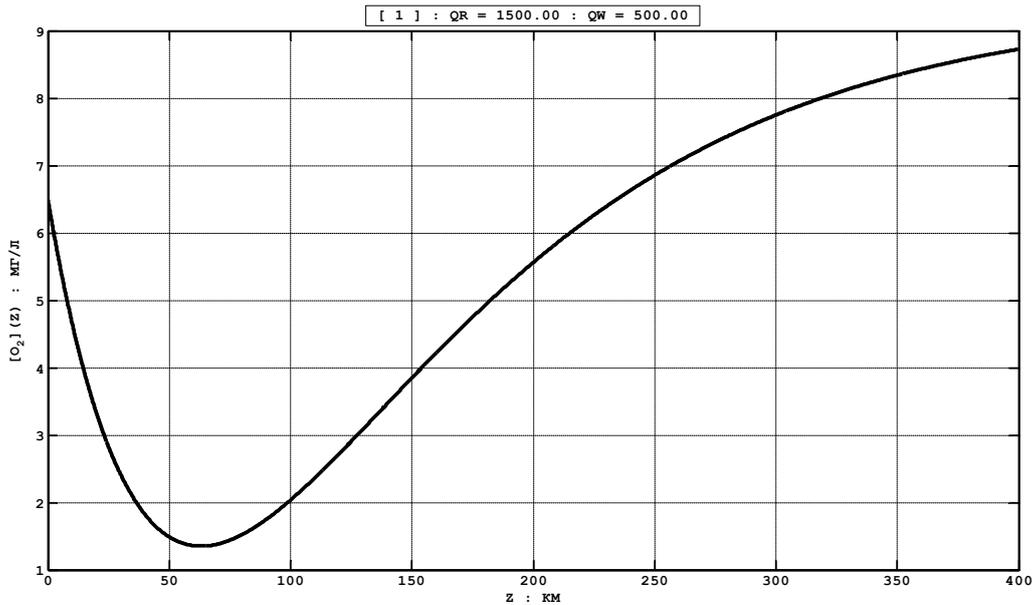


Рисунок – 2 Количество растворённого кислорода в зависимости от расстояния при QR = 1500  
Figure – 2 The amount of dissolved oxygen depending on the distance at QR = 1500

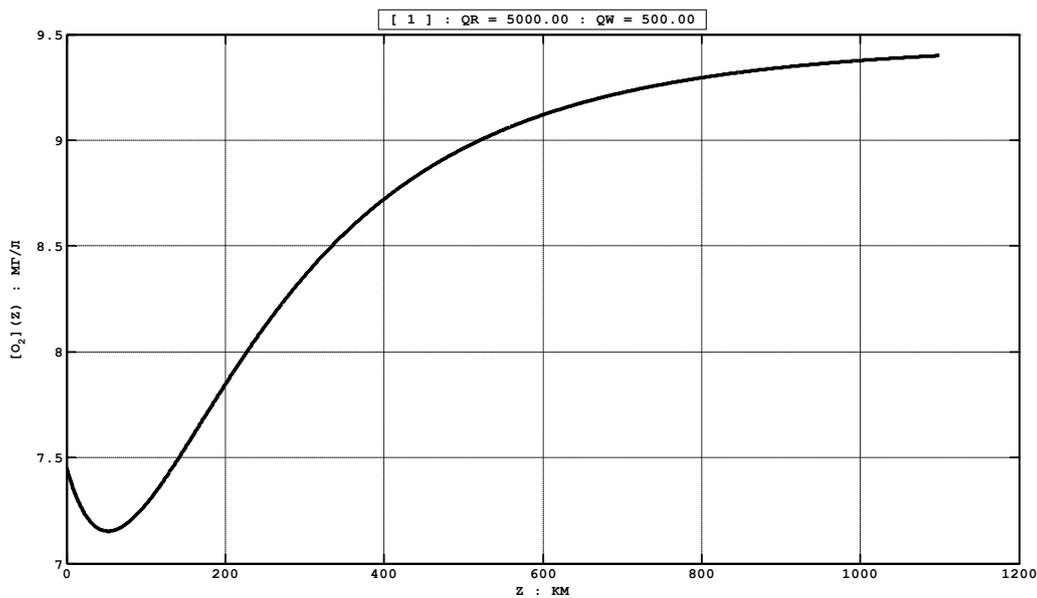


Рисунок – 3 Количество растворённого кислорода в зависимости от расстояния при QR = 5000  
Figure – 3 The amount of dissolved oxygen depending on the distance at QR = 5000

Как видно, все графики имеют ярко выраженный минимум. При этом расположение минимума по длине реки мало зависит от расхода чистой воды в реке QR.

Такой результат как независимость местоположения минимума для концентрации растворённого кислорода от расхода чистой воды в реке QR можно рассматривать как относительно новый результат.

Что касается величины концентрации растворённого кислорода в минимуме, то при большем расходе чистой воды QR наблюдается и большая концентрация растворённого кислорода.

То есть при увеличении QR качество воды по кислороду в указанном минимуме возрастает (получаем обычный эффект сильного разбавления сточных вод).

Так, при QR = 1500 имеем значение в минимуме около 1.4 мг/л, при QR = 5000 значение в минимуме составляет уже около 7.15 мг/л.

Результаты моделирования для концентрации нитрат – ионов в зависимости от расхода чистой речной воды QR по длине реки представлены на рис. 4 и рис. 5.

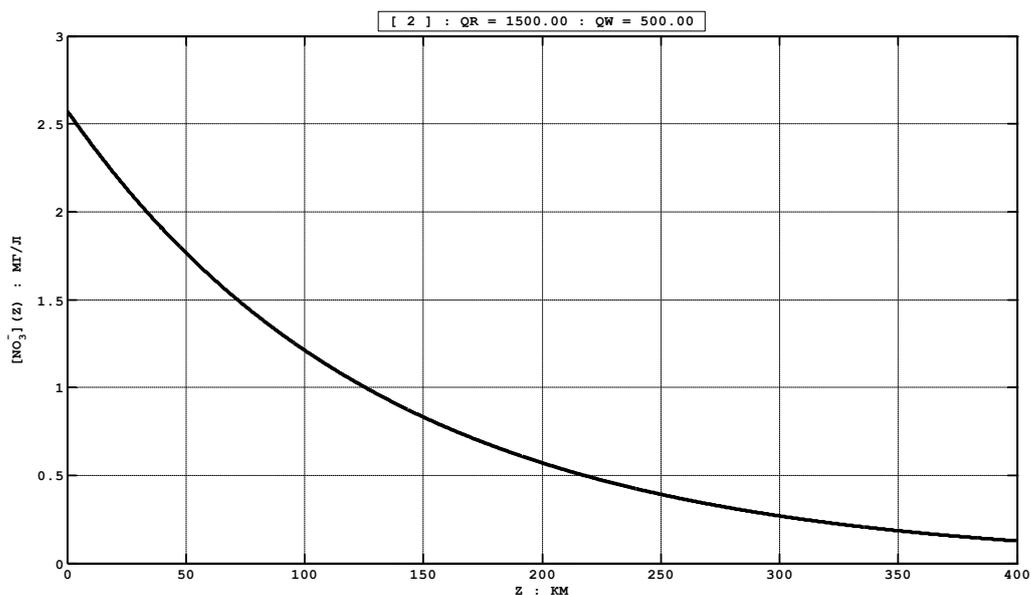


Рисунок – 4 Концентрация нитрат – ионов в зависимости от расстояния при QR = 1500  
Figure – 4 Concentration of nitrate - ions depending on the distance at QR = 1500

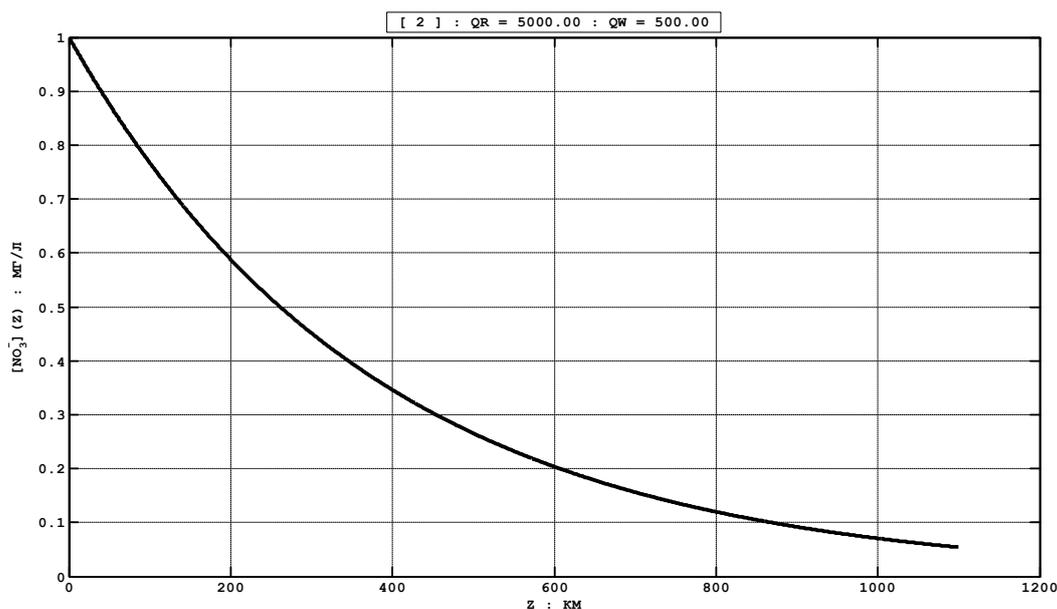


Рисунок – 5 Концентрация нитрат – ионов в зависимости от расстояния при QR = 5000  
Figure – 5 Concentration of nitrate - ions depending on the distance at QR = 5000

Как видно, графики кривых не имеют ни минимумов, ни максимумов, и при этом концентрация нитрат – ионов плавно уменьшается по течению реки по мере увеличения расстояния от места смешения чистой речной воды со сточными водами.

Далее, для примера, рассмотрим точку по течению реки, находящуюся на расстоянии  $Z = 100$  км ниже точки смешения.

При  $QR = 1500$  имеем концентрацию нитрат – ионов около 1.25 мг/л, при  $QR = 5000$  соответственно около 0.78 мг/л.

Как видно, по мере увеличения значения QR концентрация нитрат – ионов уменьшается, а качество воды по этому показателю улучшается.

То есть в данном случае поведение нитрат – ионов качественно соответствует поведению концентрации растворённого кислорода в речной воде.

И, наконец, проанализируем результаты моделирования величины биохимического потребления кислорода (BOD) в речной воде.

По сути, можно считать, что единицы измерения этой величины есть единицы измерения концентраций в мг/л.

Как следует из графиков, значение биохимического потребления кислорода плавно уменьшается по мере увеличения расстояния от точки смешения чистой речной и сточной воды. При этом графики не имеют ни минимумов, ни максимумов.

Обращает на себя внимание явная нелинейность этих зависимостей.

Как известно, при численном моделировании получают результаты при конкретных значениях параметров и начальных условиях. Соответственно, при других, даже близких по величине значениях параметров можно получить качественно другие результаты.

Например, использование таких параметров как  $SR = 0.4$  мг/л и  $SW = 40$  мг/л приводят к следующим значениям BOD на расстоянии 100 км вниз по течению реки от точки смешения :

при  $QR = 1500$  имеем  $BOD = 2.465$  мг/л,

а при  $QR = 5000$  имеем значение  $BOD = 2.408$  мг/л.

Как видим, по мере увеличения расхода чистой воды  $QR$  качество воды по BOD в данном случае **улучшается**.

Если использовать значения  $SR = 0.1$  мг/л и  $SW = 40$  мг/л, получаем значения по BOD соответственно :

при  $QR = 1500$  имеем  $BOD = 2.418$  мг/л,

а при  $QR = 5000$  имеем значение  $BOD = 2.242$  мг/л.

Таким образом, и в данном случае по мере увеличения расхода чистой воды  $QR$  качество воды по BOD **улучшается** ещё более существенно, чем в предыдущем случае.

Однако использование параметров моделирования по умолчанию ( $SR = 3$ ,  $SW = 40$ ) приводит к тому, что качество воды по BOD при возрастании расхода чистой воды  $QR$  ухудшается. Так, при значении  $QR = 1500$  имеем величину BOD на расстоянии 100 км вниз по реке от точки смешения около 3 мг/л, а при  $QR = 5000$  значение BOD составляет уже около 4 мг/л (см. рис. 6 и рис. 7).

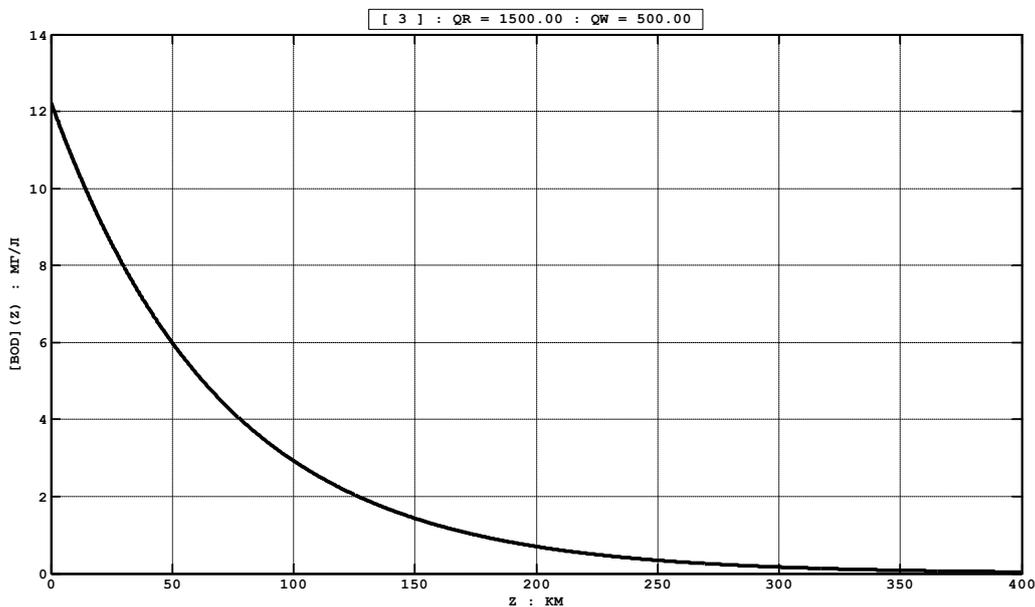


Рисунок – 6 Величина биохимического потребления кислорода в зависимости от расстояния при  $QR = 1500$

Figure – 6 The value of biochemical oxygen consumption depending on the distance at  $QR = 1500$

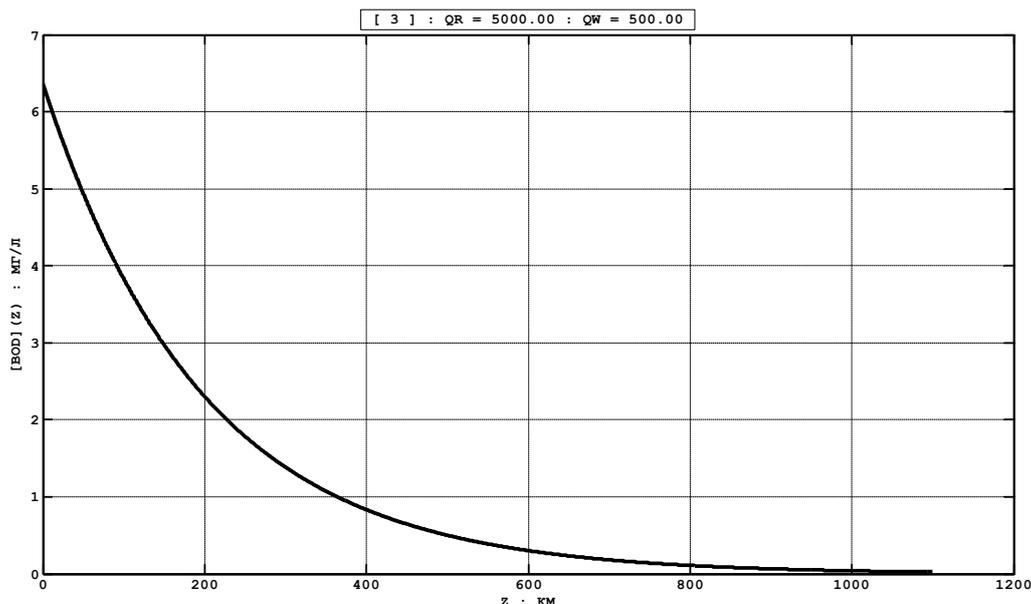


Рисунок – 7 Величина биохимического потребления кислорода в зависимости от расстояния при  $QR = 5000$

Figure – 7 The value of biochemical oxygen consumption depending on the distance at  $QR = 5000$

То есть при меньшем расходе  $QR$  имеем более чистую воду, чем при большем расходе  $QR$  !

Такое явление как ухудшение качества речной воды по BOD при резком возрастании расхода чистой воды  $QR$  часто наблюдается и в реальной действительности.

### Выводы

Использование даже простой модели обращает наше внимание на тот факт, что для точек ниже места смешения чистой речной и сточной воды по мере возрастания расхода чистой воды возможно как улучшение, так и ухудшение качества воды по отдельным показателям.

Обнаруженная возможность различного качественного поведения показателя BOD в зависимости от расхода чистой речной воды  $QR$  можно рассматривать как относительно новый результат, полученный в процессе моделирования.

### Перечень ссылок

1. Знаменский В. А. Гидрологические процессы и их роль в формировании качества воды. - Л.: Гидрометеиздат, - 1981. – 417 с.
2. Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. - М.: Химия. - 1976. – 464 с.
3. Кафаров В. В. Моделирование биохимических реакторов./ В. В. Кафаров, А. Ю. Винаров, Л. С. Гордеев. - М.: Лесная пром – сть, 1979. – 344 с.
4. Snape J. B. Dynamics of Environmental bioprocesses. Modelling and Simulation./ J. B. Snape, I. J. Dunn, J. Ingham, J. E. Prenosil. - VCH Verlagsgesellschaft mbH. – Weinheim – New York – Basel – Cambridge - Tokyo. – 1995. – 396 p.
5. Холоднов В. А. Моделирование природоохранительных процессов в системе компьютерной математики MATHCAD./В. А. Холоднов, Р.Ю. Кулишенко. - В сб. “Системы компьютерной математики и их приложения”. Материалы XIII международной научной конференции. Вып. 13. – Смоленск: Изд - во Смол. ГУ. – 2012. - С. 53 - 57.

### SEASONAL DYNAMICS OF NUTRIENTS OF LARGE WATER BODIES

**Khrutba Viktoria**, Dr.Sci.Tech., Professor, National Transport University, Head of the Department of Ecology and Life Safety, e-mail: viktorii.khrutba@gmail.com, tel.+380442885100, Ukraine, 01010, Kyiv, Omelyanovicha-Pavlenko str., 1, k. 312. [orcid.org/0000-0002-8121-2042](http://orcid.org/0000-0002-8121-2042)

**Artemenko Vladislav A.**, Ukrainian Hydrometeorological Institute, State Service on Emergencies of Ukraine and National Academy of Science of Ukraine, Hydrochemical Research, Scientific Employee, e-mail: [artemenko@uhmi.org.ua](mailto:artemenko@uhmi.org.ua), tel. 380936011250, Nauki alenue, 37, Kyiv, Ukraine, 03028.

**Petrovych Volodymyr V.**, Candidate of Technical Sciences, Professor, Senior Researcher, Professor of the Transportation Construction and Property Management Department, National Transport University. e-mail: [petrovichvv60@ukr.net](mailto:petrovichvv60@ukr.net), tel. +3804428027338, Ukraine, 01010, Kyiv, street M. Omelyanovycha-Pavlenka, 1, room 138, <https://orcid.org/0000-0003-0422-2535>

**Lukianova Vitalina V.**, Candidate of Chemical Sciences, National Transport University, Head of the Department of Ecology and Life Safety, e-mail: [vitalina\\_lk@i.ua](mailto:vitalina_lk@i.ua), tel.+380677985533, Ukraine, 01010, Kyiv, Omelyanovycha-Pavlenko str., 1, k. 312. [orcid.org/0000-0001-8964-3560](https://orcid.org/0000-0001-8964-3560)

**Abstract.** By means of computer modeling method was researched process of the diluting the sewages in rivers.

The discovered possibility the other qualitative behaviour of the factor of the value of biochemical consumption of the oxygen (BOD) depending on discharge of clean river water.

### References

1. Znamenskiy V. A. Gidrologicheskiye protsessy i ikh rol' v formirovani kachestva vody. - L.: Gidrometeoizdat, - 1981. – 417 s.
2. Kafarov V. V. Metody kibernetiki v khimii i khimicheskoy tekhnologii. - M.: Khimiya. - 1976. – 464s.
3. Kafarov V. V. Modelirovaniye biokhimicheskikh reaktorov./ V. V. Kafarov, A. YU. Vinarov, L. S. Gordeyev. - M.: Lesnaya prom – st', 1979. – 344 s.
4. Snape J. B. Dynamics of Environmental bioprocesses. Modelling and Simulation./ J. B. Snape, I. J. Dunn, J. Ingham, J. E. Prenosil. - VCH Verlagsgesellschaft mbH. – Weinheim – New York – Basel – Cambridge - Tokyo. – 1995. – 396 p.
5. Kholodnov V. A. Modelirovaniye prirodookhranitel'nykh protsessov v sisteme komp'yuternoy matematiki MATHCAD./V. A. Kholodnov, R.YU. Kulishenko. - V sb. “Sistemy komp'yuter-noy matematiki i ikh prilozheniya”. Materialy XIII mezhdunarodnoy nauchnoy konferentsii. Vyp. 13. – Smolensk: Izd - vo Smol. GU. – 2012. - S. 53 - 57.