

**Сафоник А. П., д.т.н., професор** (Національний університет водного господарства та природокористування, м. Рівне), **Полюхович О. О., провідний фахівець** (Національний університет водного господарства та природокористування, м. Рівне)

### **МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ АНАЕРОБНОЇ ОЧИСТКИ СТІЧНИХ ВОД З УРАХУВАННЯМ ВЗАЄМОДІЇ ФІЗИЧНИХ, ТЕХНІЧНИХ ТА БІОХІМІЧНИХ АСПЕКТІВ**

Розроблено узагальнену математичну модель для системи біологічного очищення стічних вод (СБО) в анаеробних біореакторах. Розроблена модель враховує фізичні, технічні та біохімічні аспекти процесів, які відбуваються у біореакторі, дозволяючи враховувати взаємодії хіміко-фізичних та біологічних факторів. Розглянуто двостадійний процес анаеробного бродіння та представлено схему процесів перетворення органічного забруднення стічних вод в анаеробних біореакторах. Запропоновано експериментальні конструкції анаеробних біореакторів на основі розробленої моделі, а також запропоновано узагальнений підхід до опису відповідних процесів та визначення їх параметрів. Математична модель дозволяє не лише враховувати фізичні та хімічні процеси, але і здійснювати оцінку невимірюваних параметрів, що характеризують стан біомаси.

*Ключові слова:* анаеробний біореактор; система біологічної очистки; математичне моделювання анаеробного біореактора; масовий баланс; біохімічні процеси; кінетичні параметри.

**Актуальність теми.** Актуальність теми дослідження зосереджена на важливості та високому практичному значенні вдосконалення процесів очищення стічних вод у біореакторах. Зростаючий обсяг стічних вод та забруднення навколишнього середовища ставлять перед суспільством виклик у справі забезпечення ефективних та стабільних систем очищення. Анаеробні біореактори виявляються однією з потенційно ефективних технологій для зменшення впливу стічних вод на довкілля.

Розробка узагальненої математичної моделі біологічного очищення стічних вод відкриває перспективи для покращення

проектування та експлуатації біореакторів, а також для розробки автоматизованих систем керування та моніторингу відповідних процесів. Такий підхід дозволяє уникнути значних втрат ресурсів та сприяє оптимальному використанню технологічних можливостей.

Дослідження в сфері математичного моделювання анаеробного очищення стічних вод є важливим етапом у вдосконаленні технічних та технологічних аспектів стічних очисних систем. Отримані результати можуть мати широкий вплив на практичне застосування в області охорони навколишнього середовища та сучасних інженерних рішень в сфері очищення стічних вод.

**Метою даної статті є** розробка узагальненої математичної моделі для аналізу процесів анаеробного очищення стічних вод у біореакторах. Зокрема, стаття спрямована на визначення взаємозв'язків між фізичними, технічними та біохімічними процесами в анаеробних біореакторах. Модель має на меті врахувати особливості цих процесів для подальшого визначення параметрів процесу очищення та розробки системи моніторингу стану об'єкта.

**Викладення основного матеріалу.** Розробка алгоритмів для аналізу стану систем анаеробної біологічної очистки вимагає математичної моделі, що враховує закономірності взаємодії процесів анаеробного бродіння. Модель повинна:

1. Забезпечувати повне відображення природи процесів для якісної системи моніторингу та керування.
2. Адекватно відображати внутрішній стан системи в нормі та у випадку несправностей, враховуючи вплив на активність та життєздатність біомаси та пригнічення мікроорганізмів.
3. Враховувати вплив вхідних параметрів та збурень  $z$  на зміну стану біомаси та процесу очищення стічних вод.
4. Відображати взаємозв'язок між спостережуваними та неспостережуваними параметрами для оцінки невимірюваних параметрів на основі вимірюваних.
5. Бути універсальною для різних конструктивних рішень анаеробних біореакторів.

На сьогоднішній день існує багато моделей, які зазвичай використовують для проектування сучасних систем очищення стічних вод (див. наприклад [1–9]). Детально описує етапи перетворення органічної речовини анаеробним біоценозом та використовує емпіричні залежності для кінетичних параметрів [9–10]. Однак вона не враховує

наявність застійних зон у анаеробних біореакторах та потребує уточнень для практичного використання.

У подальших дослідженнях пропонується спільне розглядання моделі анаеробної кінетики бродіння та рівнянь масопереносу, теплопереносу та гідродинаміки газорідного середовища для більш точного опису очищення стічних вод в анаеробних біореакторах.

Зазначимо, що існуючі [3; 6; 11] математичні моделі не дозволяють врахувати взаємозв'язки значної кількості хіміко-фізичних та біологічних процесів. Тому, розроблена узагальнена модель [5; 10] дозволить створити загальний підхід до опису процесів у різних біореакторах, що дозволить виділити загальні закономірності процесу та виробити приватні рекомендації для її використання стосовно конкретної конструкції апарату.

Математична модель анаеробного біореактора повинна детально розглядати взаємодії між фізичними, технічними та біохімічними процесами. Це важливо для визначення параметрів очищення на етапах проектування, створення діагностичних ознак узагальнених станів системи, розробки системи моніторингу стану об'єкта та оцінювання невимірюваних параметрів анаеробного бродіння. Враховуючи процес очищення стічних вод в анаеробному біореакторі, важливо враховувати поетапне перетворення органічних речовин різними групами мікроорганізмів біомаси. Анаеробне бродіння включає послідовні стадії, які призводять до розкладання органічного забруднення та утворення біогазу (рис. 1).

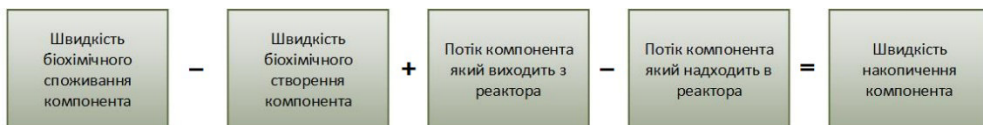


Рис. 1. Схема процесу в анаеробних біореакторах

Незважаючи на різноманітність конструкцій анаеробних біореакторів, узагальнено можна представити їх як ємність (рис. 2), обладнану пристроями для підведення стічної води, відведення очищеної води і біогазу. У робочій зоні біореактора розташована активна мікрофлора, яка окислює органічне забруднення стічної води. Крім того, біореактор може бути обладнаний теплообмінними пристроями для забезпечення необхідної температури процесу

зброджування, контрольно-вимірювальними приладами та, у деяких конструкціях, пристроями для перемішування рідини [10].

Аналіз моделей анаеробного бродіння [5], що використовують різні підходи до моделювання процесів та застосовують модель [9], свідчить, що для ефективного опису функціонування анаеробного біореактора достатньо розглядати двостадійну модель процесу [3; 6; 7]. На вхід біореактора надходить стічна вода із вмістом глюкози  $S_{in}$ . Глюкоза на першій стадії процесу поглинається групою кілотогенних мікроорганізмів при концентрації  $B_1$  і перетворюється ними на органічні кислоти, які в подальшому подаються у вигляді еквівалентної концентрації оцтової кислоти  $P$ . Оцтова кислота служить джерелом поживних речовин для метаногенів, концентрація яких у біореакторі складає  $B_2$ , і внаслідок їхньої діяльності виникає біогаз  $G$ . Біогаз, який майже не розчиняється у рідині, виводиться з біореактора об'ємом  $V_G$  через газовідвідні пристрої. Очищена вода містить залишкові забруднення, які представлені сумою залишкових концентрацій глюкози  $S_{out}$  і оцтової кислоти  $P_{out}$ , яка повинна відповідати встановленим нормам або технічним регуляціям, тобто  $S_{out} + P_{out} \leq S_{норм}$  (рис. 3).

Двостадійний процес анаеробного бродіння протікає згідно схеми:  $S + B_1 \rightarrow P$ ,  $P + B_2 \rightarrow G$  і може бути зображений, як показано на (рис. 2).

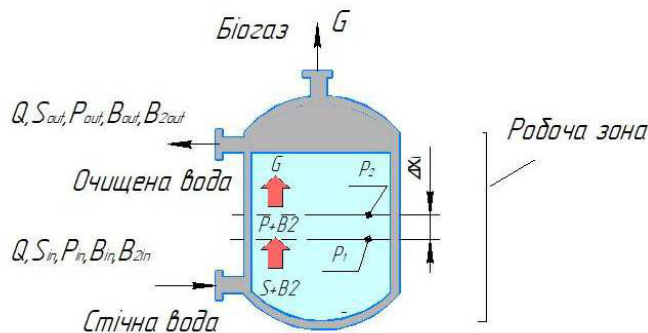


Рис. 2. Структура процесів перетворення органічних домішок у стічній воді в анаеробному біореакторі

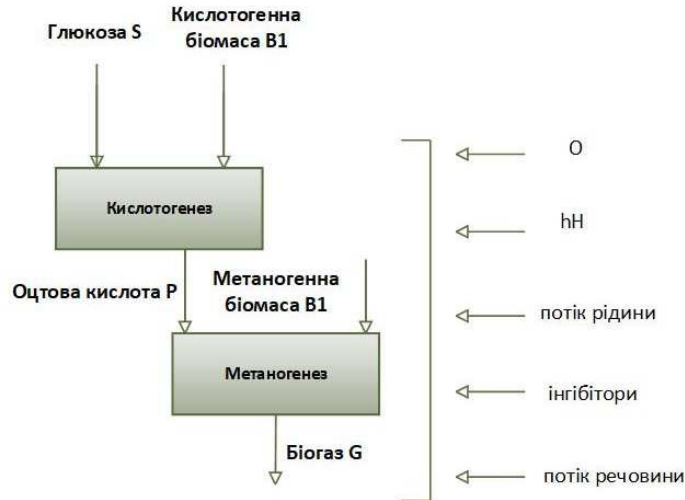


Рис. 3. Схема двоетапного процесу анаеробного розкладання органічного забруднення у стічній воді в анаеробному біореакторі

Стадії кислотогенезу та метаногенезу протікають значно повільніше, порівняно з іншими етапами, і визначають загальну швидкість процесу [2]. Збільшення інтенсивності та ефективності очищення, підвищення концентрації метану в утвореному біогазі можна досягти шляхом впливу на ці стадії за допомогою різних конструктивних рішень та зміни умов у робочій зоні біореактора. Також, зміни в показниках саме цих стадій можуть найкраще свідчити про порушення технологічного процесу очищення і надати важливу інформацію для ухвалення рішення щодо відновлення системи у працездатний стан.

Дослідження та моделювання різних процесів в анаеробних біореакторах, як описано в [7; 8; 11], свідчать про те, що швидкість зміни концентрації кожного з цих компонентів в часі описується рівнянням масового балансу апарату.

Для ключових параметрів анаеробного бродіння розроблено модельну задачу, базуючись на рівнянні масового балансу та відповідних фізичних процесах, у наступному вигляді [1; 4; 8; 9].

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C}{\partial t} = f_C \left( C, \frac{\partial C}{\partial x}, \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, W \right) - r_{S1}(B_1, C, K_1), \\ \frac{\partial P}{\partial t} = f_P \left( P, \frac{\partial P}{\partial x}, \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}, W \right) - r_{P1}(B_2, P, K_2) + r_{P2}(B_1, C, K_1), \\ \frac{\partial G}{\partial t} = f_G \left( G, C, \frac{\partial C}{\partial x}, \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \frac{\partial G}{\partial x}, \frac{\partial^2 G}{\partial x^2}, W \right) + r_{G1}(B_2, P, K_2), \\ \frac{\partial B_1}{\partial t} = f_{B1} \left( B_1, \frac{\partial B_1}{\partial x}, \frac{\partial^2 B_1}{\partial x^2}, Q, W, \theta \right) + r_{B1}(B_1, C, K_1), \\ \frac{\partial B_2}{\partial t} = f_{B2} \left( B_2, \frac{\partial B_2}{\partial x}, \frac{\partial^2 B_2}{\partial x^2}, Q, W, \theta \right) + r_{B2}(B_2, C, K_2), \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} = f_\theta \left( \theta, \frac{\partial \theta}{\partial x}, \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}, W \right), \\ \frac{\partial W}{\partial t} = f_W(W, Q, p). \end{array} \right. \quad (1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} C|_{x=0} = C_{in}(t), P|_{x=0} = P_{in}(t), G|_{x=0} = 0, B_1|_{x=0} = B_{1in}(t), B_2|_{x=0} = B_{2in}(t), \theta|_{x=0} = \theta_{in}(t), \\ \frac{\partial C}{\partial x}|_{x=L} = 0, \frac{\partial P}{\partial x}|_{x=L} = 0, \frac{\partial G}{\partial x}|_{x=L} = G^{out}, \frac{\partial B_1}{\partial x}|_{x=L} = 0, \frac{\partial B_2}{\partial x}|_{x=L} = 0, \frac{\partial \theta}{\partial x}|_{x=L} = 0, \\ C|_{t=0} = 0, P|_{t=0} = 0, G|_{t=0} = 0, G|_{t=0} = 0, B_1|_{t=0} = 0, B_2|_{t=0} = 0, \theta|_{t=0} = 0. \end{array} \right. \quad (2)$$

У задачі (1)–(2), функції  $f_S, f_P, f_G, f_{B1}, f_{B2}$  визначають розподіл концентрацій глюкози, оцтової кислоти, біогазу, кислотогенної та метаногенної біомаси в біореакторі і описуються рівняннями конвективного масопереносу. Структура цих рівнянь залежить від конструкції біореактора та відповідних значень вектора  $K$ .  $f_\theta, f_W$  – функції, які встановлюють поле температур і гідродинамічний стан біореактора, відповідно, і включають компоненти векторів  $P_r$  і  $T_{erm}$  та вигляд, який характеризує конструктивне виконання  $K$  біореактора. Функції  $r_{S1}, r_{P1}, r_{P2}, r_G, r_{B1}, r_{B2}$  визначають біохімічні процеси в ході анаеробного очищення стічних вод, такі як розкладання органічної речовини, утворення продуктів мікробіологічних реакцій і зростання популяції мікроорганізмів. Вектори  $K_1 = (\mu_1, Y_{X1}, K_{SX1}, K_{mX1}, K_{S1}, Y_{S1})$  і  $K_2 = (\mu_2, Y_{X2}, K_{SX2}, K_{mX2}, K_{S2}, Y_{S2}, V_{max}, K_m, K_{im})$  представляють собою набір

кінетичних параметрів, які характеризують особливості життєдіяльності відповідно кислотогенної та метаногенної популяції мікроорганізмів. Ці параметри залежать від видового складу біомаси, умов її розвитку та життєдіяльності, в основному від температури  $\theta_x$  у робочій зоні біореактора, і визначаються емпірично або на основі стехіометричних співвідношень.

Запропонований запис математичної моделі (1) дозволяє сумісно розглядати фізичні та біохімічні процеси та їх взаємний вплив під час анаеробного біологічного очищення стічних вод. У цьому контексті розподіл речовин та біомаси в біореакторі описується за допомогою відомих рівнянь масопереносу та матеріального балансу, які доповнюються компонентами біохімічної реакції.

Відмінності моделі СБО (1) в порівнянні із відомими визначаються кількома ключовими положеннями:

1. Модель враховує основні процеси в біореакторі, що визначають його конструктивні та експлуатаційні параметри. Це має важливе значення як для проектування систем анаеробного біологічного очищення, так і для розробки алгоритмів управління локальними очисними спорудами.
2. Модель описує внутрішній стан системи анаеробного очищення стічних вод, який визначається концентраціями речовин та біомаси, а також кінетичними параметрами, що характеризують активність мікроорганізмів.
3. Модель враховує вплив вхідних параметрів системи, таких як концентрації органічних речовин у вхідному потоці стічної води, кислотність стоку, температура процесу, швидкість розведення та витрата стічної води в апараті. Це дозволяє розробляти алгоритми обчислення параметрів, які не можна безпосередньо виміряти в процесі анаеробного бродіння.
4. Початкові та граничні умови для розв'язання системи (2) залежать від конкретної конструкції та принципу дії біореактора, що дозволяє використовувати її для різних конструкцій систем анаеробного очищення.
5. Модель є основою для створення комп'ютерної моделі СБО, яка включається в структуру системи моніторингу загального стану СБО. Це особливо важливо, оскільки разом з частково невимірюваними біохімічними характеристиками вона містить

технічні параметри СБО (компоненти векторів  $P_r$ ,  $T_{erm}$ ,  $K$ ), які доступні для вимірювання.

Ці характеристики моделі (1) роблять її універсальною, оскільки вона може використовуватися для більшості типів анаеробних біореакторів. В певних конструкціях анаеробних біореакторів аналогічні рівняння, які включає (1), вже відомі [11]. Проте їх аналітичне розв'язання часто ускладнене або неможливе, що призводить до необхідності використання чисельних методів та створення комп'ютерних моделей анаеробних біореакторів.

**Висновок.** На основі аналізу узагальненої математичної моделі (2) можна здійснити наступні важливі завдання:

1. Визначення необхідних керуючих впливів системи автоматизованого/автоматичного керування анаеробним біореактором. Це включає можливість впливу на процес шляхом зміни температури, витрати рідини та введення реагентів, що сприяє стабілізації очищення стічних вод.
2. Синтез системи автоматичного керування. Математична модель (1) може служити основою для створення системи керування анаеробним біореактором, яка враховує різноманітні умови та вхідні параметри.
3. Аналіз впливу факторів на технологічний процес. Врахування різних факторів, таких як температура, кислотність, та витрати стічної води, дозволяє визначити їх вплив на ефективність очищення та розкладання органічних забруднень.
4. Розробка системи моніторингу та підтримки рішень. Використання моделі для аналізу стану анаеробної біомаси та системи біологічного очищення сприяє розробці системи моніторингу та прийняття управлінських рішень.
5. Оцінка ризиків та управління технологічним процесом. Врахування факторів, таких як пікові навантаження та аварійні ситуації, дозволяє ефективно управляти технологічним процесом та зменшувати ймовірність ризиків.

Узагальнена математична модель (1) є потужним інструментом для вирішення цих завдань, надаючи засоби для комплексного вивчення фізичних та біохімічних процесів в анаеробних біореакторах. Однак, для успішної практичної реалізації цієї моделі, необхідно уточнення початкових та граничних умов, що може вимагати



додаткових лабораторних досліджень і врахування різноманітних умов експлуатації анаеробних біореакторів.

**1.** Anaerobic digestion model No. 1 (ADM1). Scientific & technical report No. 13 / Batstone D. J., Keller J., Angelidaki I., Kalyuzhnyi S. V., Pavlostathis S. G., Rozzi A., Sanders W. T. M., Siegrist H., Vavilin V. A. IWA Publishing, 2002. 80 p. **2.** Andrii Safonyk, Ivan Tarhonii, Ivanna Hrytsiuk, Andrii Rudyk, Ihor Ilkiv Dynamic optimization of the technological water treatment process automatic control system. *Conference Paper 11th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT2021)*. 2021. Deggendorf, Germany. Pp. 13–18. DOI: 10.1109/ACIT49673.2020.9208814. **3.** Batstone D. J., Puyol D., Flores-Alsina X. Mathematical modelling of anaerobic digestion processes: applications and future needs. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*. 2015. Vol. 14. P. 595–613. **4.** Bomba A., Safonyk A. Mathematical modeling of aerobic wastewater treatment in porous medium. *Zeszyty Naukowe. Wyższej Szkoły Informatyki i Umiejętności*. Łódź : Poland, 2013. Vol. 12, Nr 1. P. 21–29. **5.** Havlik I., Votruba J., Sobotka M. Mathematical modeling of the anaerobic digestion process: application of dynamic mass-energy balance. *Folia Microbiol.* 1986. Vol. 31. P. 56–68. **6.** Lyberatos G., Skiadas I. V. Modelling of anaerobic digestion – a review. *Global Nest : the Int. J.* 1999. Vol. 1, № 2. P. 63–76. **7.** Safonyk A., Safonyk O., & Zhabchuk V. Modeling and automation processes of water purification from multicomponent pollution. *Modeling, Control and Information Technologies*. 2019. Vol. 3. P. 64–66. **8.** Simeonov I., Stoyanov S. Modelling and dynamic compensator control of the anaerobic digestion of organic wastes. *Chem. Biochem. Eng. Q.* 2003. № 17 (4). P. 285–292. **9.** The IWA anaerobic digestion model No 1. / D. Batstone, J. Keller, I. Angelidaki, S. Kalyuzhnyi, S. Pavlostathis, A. Rozzi, W. Sanders, H. Siegrist, V. Vavilin. *Wat. Sci. Technol.* 2002. Vol. 45, N 10. P. 65–73. **10.** Vlasyuk A. P., Ilkiv I. V. Mathematical modelling of salt transfer to system of horizontal drains in zones of complete and incomplete saturation under nonisothermal conditions. *Problems of decision making under uncertainties»* : XXXII International Conference PDMU. Abstract Internat. Conf. Czech Republic, Prague, August 27–31, 2018. P. 132. **11.** Бомба А. Я., Сафоник А. П. Задача ідентифікації масообмінного параметра сингулярно збуреного процесу очищення рідин від багатокомпонентного забруднення. *Вісник Харківського національного університету. Сер. Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи керування*. 2015. Вип. 26. № 1156. С. 36–45.

## REFERENCES:

**1.** Anaerobic digestion model No. 1 (ADM1). Scientific & technical report No. 13 / Batstone D. J., Keller J., Angelidaki I., Kalyuzhnyi S. V., Pavlostathis S. G., Rozzi A., Sanders W. T. M., Siegrist H., Vavilin V. A. IWA Publishing, 2002. 80 p. **2.**

Andrii Safonyk, Ivan Tarhonii, Ivanna Hrytsiuk, Andrii Rudyk, Ihor Ilkiv Dynamic optimization of the technological water treatment process automatic control system. *Conference Paper 11th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT2021)*. 2021. Deggendorf, Germany. Pp. 13–18. DOI: 10.1109/ACIT49673.2020.9208814. **3.** Batstone D. J., Puyol D., Flores-Alsina X. Mathematical modelling of anaerobic digestion processes: applications and future needs. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*. 2015. Vol. 14. P. 595–613. **4.** Bomba A., Safonyk A. Mathematical modeling of aerobic wastewater treatment in porous medium. *Zeszyty Naukowe. Wyższej Szkoły Informatyki i Umiejętności*. Łódź : Poland, 2013. Vol. 12, Nr 1. P. 21–29. **5.** Havlik I., Votruba J., Sobotka M. Mathematical modeling of the anaerobic digestion process: application of dynamic mass-energy balance. *Folia Microbiol.* 1986. Vol. 31. P. 56–68. **6.** Lyberatos G., Skiadas I. V. Modelling of anaerobic digestion – a review. *Global Nest : the Int. J.* 1999. Vol. 1, № 2. P. 63–76. **7.** Safonyk A., Safonyk O., & Zhabchuk V. Modeling and automation processes of water purification from multicomponent pollution. *Modeling, Control and Information Technologies*. 2019. Vol. 3. P. 64–66. **8.** Simeonov I., Stoyanov S. Modelling and dynamic compensator control of the anaerobic digestion of organic wastes. *Chem. Biochem. Eng. Q.* 2003. № 17 (4). P. 285–292. **9.** The IWA anaerobic digestion model No 1. / D. Batstone, J. Keller, I. Angelidaki, S. Kalyuzhnyi, S. Pavlostathis, A. Rozzi, W. Sanders, H. Siegrist, V. Vavilin. *Wat. Sci. Technol.* 2002. Vol. 45, N 10. P. 65–73. **10.** Vlasyuk A. P., Ilkiv I. V. Mathematical modelling of salt transfer to system of horizontal drains in zones of complete and incomplete saturation under nonisothermal conditions. *Problems of decision making under uncertainties» : XXXII International Conference PDMU*. Abstract Internat. Conf. Czech Republic, Prague, August 27–31, 2018. P. 132. **11.** Bomba A. Ya., Safonyk A. P. Zadacha identyfikatsii masoobminnoho parametra synhuliarno zburеноho protsesu ochyshchennia ridyn vid bahatokomponentnoho zabrudnennia. *Visnyk Kharkivskoho natsionalnoho universytetu. Ser. Matematychnе modeliuвання. Informatsiini tekhnolohii. Avtomatyzovani systemy keruvannia*. 2015. Vyp. 26. № 1156. S. 36–45.

---

**Safonyk A. P., Doctor of Engineering, Professor** (National University of Water and Environmental Engineering, Rivne), **Poliukhovych O. O., Leading Specialist** (National University of Water and Environmental Engineering, Rivne)

### **MODELING OF THE ANAEROBIC WASTEWATER TREATMENT PROCESS TAKING INTO ACCOUNT THE INTERACTION OF PHYSICAL, TECHNICAL AND BIOCHEMICAL ASPECTS**

**A generalized mathematical model for the system of biological wastewater treatment (BWT) in anaerobic bioreactors has been developed. Our model takes into account the physical, technical and biochemical aspects of the processes that take place in the bioreactor, allowing to take into account the interactions of chemical-physical and biological factors. The two-stage process of anaerobic fermentation is considered and the scheme of processes of transformation of organic pollution of wastewater in anaerobic bioreactors is presented. Experimental designs of anaerobic bioreactors based on the developed model are proposed, as well as a generalized approach to describing relevant processes and determining their parameters. The mathematical model allows to evaluate non-measurable parameters characterizing the state of biomass but not only take into account physical and chemical processes.**

***Keywords:* anaerobic bioreactor; biological purification system; mathematical modeling of anaerobic bioreactor; mass balance; biochemical processes; kinetic parameters.**

---