

В. Л. Поляков

Моделирование биофильтрации воды с ограниченным содержанием органического субстрата. Аэробная биопленка

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины А. Я. Олейником)

Одержано наближений розв'язок стаціонарної задачі дії біоплівки при обмеженому вмісті органічних сполук (субстрату) у воді. Завдяки його додатковому спрощенню отримано формули для концентрації і потоку субстрату залежно від параметрів зовнішньої течії і біоплівки. Шляхом зіставлення з строгим розв'язком показано високу точність наближених формул при зміні вказаних параметрів у широких межах.

Растворенные органические соединения часто составляют весьма существенную часть загрязнения воды после ее использования в коммунальном, сельском хозяйстве, промышленных технологических циклах. Последующее применение такой воды даже в технических целях возможно только после резкого снижения их содержания. Наиболее эффективными в этом плане являются биологические методы водоочистки, а при доведении качества воды до стандарта питьевой — фильтрация через затопленные пористые (зернистые) загрузки биореакторов-фильтров. Прочно закрепившиеся на ее элементах микроорганизмы вместе с продуктами своей жизнедеятельности (метаболитами) образуют биопленки, для которых вышеупомянутые соединения служат источниками энергии и материалом для биосинтеза [1, 2]. Именно совокупность биопленок, основная компонента разнообразной биоты в загрузке, в состоянии обеспечить почти полную утилизацию растворенной органики (субстрата) путем последовательной трансформации высокомолекулярных соединений в низкомолекулярные и затем в нетоксичные простые формы [3]. Количество и активность фиксированного биоценоза тесно связаны с концентрацией субстрата в фильтрационном потоке, которая, благодаря, главным образом, влиянию биопленок, быстро снижается.

Таким образом, математическое моделирование биофильтрации (совместные фильтрация воды и биоокисление органики) необходимо выполнять на двух взаимосвязанных уровнях — микро (биопленка) и макро (фильтр) [4, 5]. Базовыми следует считать микроуровень и структурную модель биопленки. Поэтому наша работа посвящена теоретическому анализу поведения субстрата в ней, выводу и обоснованию упрощенных формул для определения таких важнейших физико-химических характеристик как концентрация, поток, что будет способствовать разработке методики расчета установившегося биофильтрации. Ввиду большой сложности его условий моделированию предшествует их серьезная схематизация, которая заключается в принятии ряда разумных допущений. Так, при формализации функционирования биопленки полагается, что исходная модель является квази(стационарной) (время присутствует только в качестве параметра) [6, 7]; биопленка плоская и однородная; перенос субстрата осуществляется за счет молекулярной диффузии [8]; скорость деградации субстрата лимитируется лишь его концентрацией, согласно кинетике Михаэлиса-Мэнтен [9]. Если некоторые из отмеченных допущений оказываются некорректными, то нередко исходную модель можно оставить без изменений, вводя в нее

соответствующие эффективные коэффициенты. В итоге модель аэробной биопленки принимает следующий вид:

$$D \frac{d^2 S}{dx^2} = \lambda R(S) = \frac{\lambda S}{K + S}; \quad (1)$$

$$x = 0, \quad \frac{dS}{dx} = 0; \quad x = L_f, \quad D \frac{dS}{dx} + \gamma(S - S_w) = 0. \quad (2)$$

Здесь S — концентрация субстрата в биопленке; D — эффективный коэффициент диффузии; λ — приведенный коэффициент максимальной скорости роста биомассы; K — константа полунасыщения; L_f — толщина биопленки; γ — коэффициент массопереноса через жидкую пограничную пленку [10]; S_w — концентрация субстрата в потоке жидкости (вне жидкой пленки). Строгое решение задачи (1), (2) в безразмерной форме выражается системой уравнений [11]

$$\int_{\bar{S}_g}^{\bar{S}_f} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi - \bar{S}_g - \bar{K} \ln \frac{\xi + \bar{K}}{\bar{S}_g + \bar{K}}}} = 2\sqrt{\bar{\lambda}} \bar{L}_f, \quad (3)$$

$$\bar{S}_f - \bar{S}_g - \bar{K} \ln \frac{\bar{S}_f + \bar{K}}{\bar{S}_g + \bar{K}} = \frac{\bar{\gamma}^2}{2\bar{\lambda}} (\bar{S}_w - \bar{S}_f)^2, \quad (4)$$

$$\bar{x} = \bar{L}_f - \frac{1}{2\sqrt{\bar{\lambda}}} \int_{\bar{S}}^{\bar{S}_f} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi - \bar{S}_g - \bar{K} \ln \frac{\xi + \bar{K}}{\bar{S}_g + \bar{K}}}}, \quad (5)$$

где S_f, S_g — концентрации субстрата на границе биопленки с жидкой пленкой и зерном ($x = 0$), $\bar{S} = S/S_0$, $\bar{S}_{f,g,w} = S_{f,g,w}/S_0$, S_0 — концентрация субстрата на входе в фильтр; $\bar{K} = K/S_0$, $\bar{\lambda} = \lambda L_0^2 / (DS_0)$, L_0 — радиус зерна; $\bar{x} = x/L_0$, $\bar{L}_f = L_f/L_0$, $\bar{\gamma} = \gamma L_0 / D$. Данное решение можно рассматривать как эталон при разного рода оценках, но для расчетов биофильтрации удастся использовать с немалыми затруднениями лишь его частный случай (3) или приближенное решение задачи (1), (2), которое будет построено и проверено ниже путем сравнения с точными выражениями (3)–(5). В указанном случае относительная концентрация на внешней границе биопленки будет

$$\bar{S}_f = \frac{\chi (\nu_1 - \sqrt{\Delta})}{\nu_2} \bar{S}_w, \quad (6)$$

где $\chi = \bar{\gamma} / \sqrt{\bar{\lambda}}$, $\Delta = \nu_1^2 - \nu_0 \nu_2$, $\nu_0 = 1 + e^{2\sqrt{\bar{\lambda}} \bar{L}_f}$, $\nu_1 = \chi - 1 + \chi e^{2\sqrt{\bar{\lambda}} \bar{L}_f}$, $\nu_2 = (1 - \chi)^2 - (1 - \chi^2) e^{2\sqrt{\bar{\lambda}} \bar{L}_f}$. Таким образом, относительный поток в биопленку с учетом (6) составит

$$\bar{L}_f = \bar{\gamma} (\bar{S}_w - \bar{S}_f) = \frac{\bar{\gamma} (\nu_2 - \chi \nu_1 + \chi \sqrt{\Delta})}{\nu_2} \bar{S}_w. \quad (7)$$

Применение формул (6), (7) при количественном анализе биофильтрации оправдано только к нижней части загрузки, где концентрация субстрата, как правило, намного меньше

входной. Использование же их на верхнем участке обязательно приведет к большим погрешностям. Поэтому получено приближенное решение исходной задачи (1), (2) при произвольной величине S_w . С этой целью функция источника $R(S)$ предварительно осредняется на отрезке $[0, X]$, так что

$$R_c(X) = \frac{1}{X} \int_0^X \frac{\bar{S}(\bar{x})}{\bar{K} + \bar{S}(\bar{x})} d\bar{x} = 1 - \frac{\bar{K}}{X} \int_0^X \frac{d\bar{x}}{\bar{K} + \bar{S}(\bar{x})}. \quad (8)$$

В результате двойного интегрирования уравнения (1) с учетом (2) и (8) найдено

$$\bar{S}(\bar{x}, R_c) = \bar{S}_w - \frac{\bar{\lambda} \bar{L}_f}{\bar{\gamma}} R_c - \frac{\bar{\lambda} R_c}{2} (\bar{L}_f^2 - \bar{x}^2). \quad (9)$$

С помощью (8), (9) выведено уравнение относительно $R_c(X)$

$$R_c = 1 - \frac{2\bar{K}}{\bar{\lambda} X R_c} \int_0^X \frac{d\bar{x}}{\bar{x}^2 + b^2}, \quad (10)$$

где

$$b^2 = \frac{2}{\bar{\lambda} R_c} \left(\bar{K} + \bar{S}_w - \frac{\bar{\lambda} \bar{L}_f}{\bar{\gamma}} R_c \right) - \bar{L}_f^2.$$

Теперь, если отождествить X с \bar{x} , то уравнение (10) примет вид

$$R_c + \frac{2\bar{K}}{\bar{\lambda} R_c b(R_c) \bar{x}} \operatorname{arctg} \frac{\bar{x}}{b(R_c)} = 1. \quad (11)$$

При обычно справедливом соотношении $\bar{L}_f/b \ll 1$ можно разложить функцию arctg в ряд Тейлора и сохранить лишь первый член. Тогда

$$R_c = \frac{1}{2\varphi} \left(\bar{S}_w + \bar{K} + \varphi - \sqrt{(\bar{S}_w + \bar{K} + \varphi)^2 - 4\varphi \bar{S}_w} \right), \quad (12)$$

где $\varphi = \frac{\bar{\lambda} \bar{L}_f}{2\bar{\gamma}} (2 + \bar{\gamma} \bar{L}_f)$. Следовательно, концентрация субстрата на границе между пленками, согласно (9) и (12), будет

$$\bar{S}_f = \bar{S}_w - \frac{1}{2 + \bar{\gamma} \bar{L}_f} \left(\bar{S}_w + \bar{K} + \varphi - \sqrt{(\bar{S}_w + \bar{K} + \varphi)^2 - 4\varphi \bar{S}_w} \right). \quad (13)$$

Итак, поток субстрата в био пленку примерно равен

$$\bar{i}_f = \frac{\bar{\gamma}}{2 + \bar{\gamma} \bar{L}_f} \left(\bar{S}_w + \bar{K} + \varphi - \sqrt{(\bar{S}_w + \bar{K} + \varphi)^2 - 4\varphi \bar{S}_w} \right). \quad (14)$$

Более точное, хотя и громоздкое представление R_c удается получить, если в разложении функции arctg в (11) учесть уже два члена. Тогда параметр R_c зависит от \bar{x} , а при $\bar{x} = \bar{L}_f$ его следует находить из кубического уравнения

$$\begin{aligned} \varphi^2 R_c^3 - [\varphi^2 + 2\varphi(\bar{S}_w + \bar{K})]R_c^2 + \left[(\bar{S}_w + \bar{K} + \varphi)^2 - \varphi^2 - \bar{K}\varphi - \frac{\bar{\lambda}\bar{K}\bar{L}_f^2}{6} \right] R_c - \\ - \bar{S}_w(\bar{S}_w + \bar{K}) = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Применив к (15) формулу Кардано, несложно выразить R_c через \bar{S}_w, \bar{L}_f . Выведенная таким образом зависимость $R_c(\bar{S}_w, \bar{L}_f)$ после подстановки в (9) позволяет надежнее определять концентрацию \bar{S}_f и поток \bar{i}_f при больших значениях $\bar{\lambda}$ и \bar{L}_f .

Так как полученное выше приближенное решение и формула (14) имеют ключевое значение для разработки методики расчета биофильтрования, то оценке их точности было уделено повышенное внимание. Анализ многочисленных литературных источников показал, что параметры исходной задачи при работе биореактора-фильтра в разнообразных условиях изменяются в весьма широких пределах, а именно, $\bar{\lambda}$ от 20 до 200, $\bar{\gamma}$ от 10 до 40 [1, 12–14]. Ввиду ограниченности порового пространства в зернистых средах (n_0 составляет несколько десятых) относительная толщина биопленки должна быть меньше 0,15–0,2. В действительности, из-за действия гидродинамической силы и снижения прочности биопленки по мере ее утолщения максимальный удельный объем аккумулируемой биомассы существенно меньше n_0 (в два раза или около того). Таким образом, величина \bar{L}_f редко превышает 0,1. Тем не менее, при анализе точности приближенного решения концентрация \bar{S}_f определялась при значениях \bar{L}_f вплоть до 0,15, что отвечает удельному объему биомассы $(0,7 - 0,8)n_0$. При расчете же относительного потока \bar{i}_f толщина биопленки фиксировалась и были выбраны для нее типичные значения 0,05 и 0,1. Константа полунасыщения или непрерывно менялась на отрезке $[0, 1]$, или брались ее характерные значения 0,5 и 1. Вычисления проводились параллельно с использованием точного решения (3)–(5), приближенного (9) и (11) и упрощенного приближенного (13), (14), чтобы продемонстрировать правомочность применения в приложениях последнего.

В первую очередь рассчитана зависимость $\bar{S}_f(\bar{L}_f)$ для трех примеров, в которых параметры $\bar{\lambda}, \bar{\gamma}$ принимают средние или крайние значения из вышеупомянутых диапазонов. Так, в примере 1 взяты $\bar{\lambda} = 100, \bar{\gamma} = 25$, в примере 2 — $\bar{\lambda} = 20, \bar{\gamma} = 10$, в примере 3 — $\bar{\lambda} = 200, \bar{\gamma} = 40$. Данные расчетов представлены на рис. 1, *a* и *b* и в целом свидетельствуют о высокой точности приближенного решения при $\bar{L}_f \leq 0,125$. Вместе с тем хорошую точность обеспечивает и формула (14) при $\bar{L}_f \leq 0,1$, которая и будет в дальнейшем задействована в модели биофильтрования. При больших значениях \bar{L}_f , которые редко встречаются на практике, погрешность в вычислениях \bar{S}_f возрастает. Затем на основании отмеченных данных по \bar{S}_f и формулы для потока субстрата в биопленку (7) анализировались ошибки в приближенных расчетах \bar{i}_f . При определении R_c из уравнения (11) и $\bar{L}_f \leq 0,125$ они не превысили 4%, а в основном были заметно меньше 1–2%. Вместе с тем применение упрощенного приближенного решения, выраженного формулой (14), обуславливало уже неточности до 5% при $\bar{L}_f \leq 0,1$. Наибольшее отклонение от точного результата имело место в третьем примере, где погрешность в вычислении \bar{i}_f достигла 10%. В таком случае появляется смысл дополнительно учитывать второй член в разложении функции из (11), а затем выражение для R_c находить из уравнения (15).

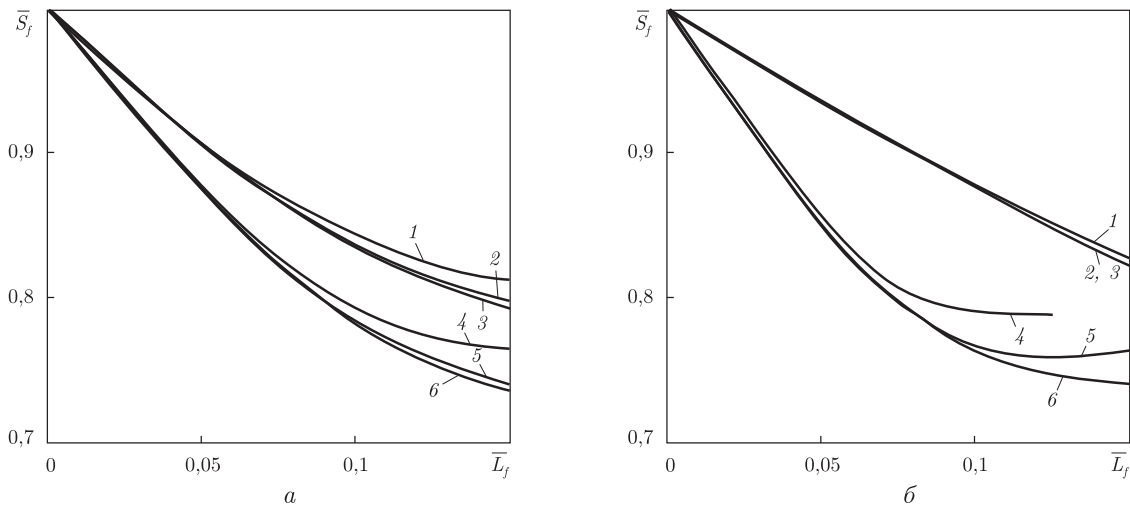


Рис. 1. Графики зависимости $\bar{S}_f(\bar{L}_f)$: а — $1-\beta-\bar{K}=1$; $4-6-\bar{K}=0,5$; 1, 4 — приближенные решения по (13); 2, 5 — приближенные по (9), (11); 3, 6 — точное решение; б — $1-\beta-\bar{\gamma}=10, \bar{\lambda}=20$; $4-6-\bar{\gamma}=40, \bar{\lambda}=200$; 1, 4 — по формуле (13); 3, 5 — по формулам (9), (11); 2, 6 — точное решение

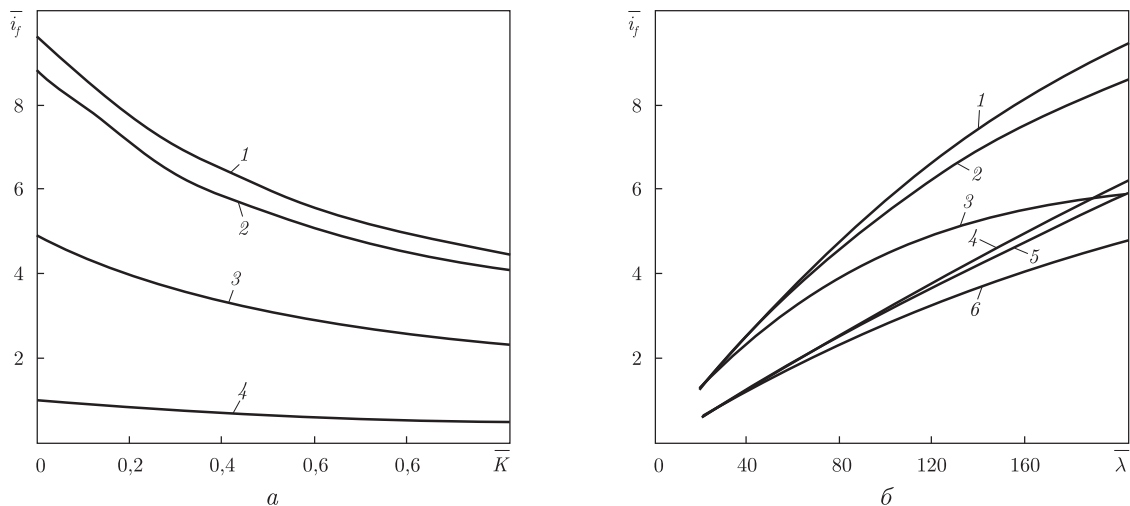


Рис. 2. Графики зависимости $\bar{i}_f(\bar{K})$: а — 1, 3, 4 — $\bar{L}_f = 0,05$, 2 — $\bar{L}_f = 0,1$; 1 — пример 3; 2, 3 — пример 1; 4 — пример 2; б — $1-\beta-\bar{K}=0,5, 4-6-\bar{K}=1$; 1, 4 — $\bar{\gamma}=40$; 2, 5 — $\bar{\gamma}=25$; 3, 6 — $\bar{\gamma}=10$

Предметом последующих расчетов на базе (7), (9), (10) стал поток \bar{i}_f в зависимости от непрерывно или дискретно меняющихся модельных параметров \bar{K} и $\bar{\lambda}$ при двух фиксированных значениях \bar{L}_f (0,05 и 0,1), трех $\bar{\gamma}$ (10, 25, 40). На рис. 2, а показаны кривые $\bar{i}_f - \bar{K}$, которые существенно снижаются при изменении \bar{K} от 0 до 1, указывая тем самым на значимость лимитирования скорости утилизации субстрата. Пренебрежение этим фактором может приводить к значительному завышению потока \bar{i}_f , а в конечном итоге — к переоценке эффективности действия биореактора-фильтра, особенно при больших значениях λ . Наконец, на рис. 2, б изображены графики зависимости $\bar{i}_f(\bar{\lambda})$ для двух значений \bar{K} и $\bar{L}_f = 0,1$. Увеличение коэффициента $\bar{\lambda}$ за счет принятия больших концентрации биомассы, скорости ее роста ведет к почти линейному росту \bar{i}_f . Этот эффект сильнее выражен при $\bar{K} = 0,5$ и $\bar{\gamma} = 40$.

В заключение следует подчеркнуть, что полученное выше приближенное решение стационарной задачи действия отдельной, плоской биопленки при сравнительно низком содержании органического субстрата в воде позволяет выразить его приток через концентрацию в фильтрационном течении и модельные параметры. Вытекающие из решения после его незначительного упрощения формулы обеспечивают высокую точность в расчетах концентраций, массопереноса при изменении указанных параметров в реальных широких пределах. Таким образом, становится возможным простое аналитическое представление функции стока для субстрата в задаче биофильтрации, а значит, и разработка методики инженерного расчета работы биореакторов-фильтров.

1. Хенце М., Армозс П., Ля-Кур-Янсун И., Арван Э. Очистка сточных вод. – Москва: Мир, 2006. – 480 с.
2. Rittmann B. E. The significance of biofilms in porous media // *Water Res.* – 1993. – **27**, No 7. – P. 2195–2202.
3. Rohold Z., Harramoes R. Degradation of non-diffusible organic matter in biofilm reactors // *Ibid.* – 1993. – **27**, No 11. – P. 1689–1699.
4. Олейник А. Я., Васильенко Т. В., Рыбаченко С. А., Хамад И. А. Моделирование процессов доочистки хозяйственно-бытовых сточных вод на фильтрах // *Пробл. водопостачання, водовідведення та гідрравліки.* – 2006. – Вип. 7. – С. 85–97.
5. Taylor S. W., Jaffe P. R. Substrate and biomass transport in a porous medium // *Water Resour. Res.* – 1990. – **26**, No 9. – P. 2181–2194.
6. Jih C.-G., Huang J.-S. Effect of biofilm thickness distribution on substrate-inhibited kinetics // *Water Res.* – 1994. – **28**, No 4. – P. 967–973.
7. Liu Y., Tay J.-H. The essential role of hydrodynamic shear force in the formation of biofilm and granular sludge. Review // *Ibid.* – 2002. – **36**. – P. 1635–1665.
8. Zhang T. C., Bishop P. L. Evaluation of tortuosity factors and effective diffusivities in biofilms // *Ibid.* – 1994. – **28**. – P. 2279–2287.
9. Бертокс П., Радд Д. Стратегия защиты окружающей среды от загрязнений. – Москва: Мир, 1980. – 606 с.
10. Meshko V., Markovska L., Mincheva M. V., Rodrigues A. E. Adsorption of basic dyes on granulated activated carbon and natural zeolite // *Water Res.* – 2001. – **35**, No 14. – P. 3357–3366.
11. Поляков В. Л. О моделировании действия аэробной биопленки при доочистке сточных вод фильтрованием // *Пробл. водопостачання, водовідведення та гідрравліки.* – 2010. – Вип. 14. – С. 71–81.
12. Horn H., Hempel D. C. Growth and decay in an auto/heterotrophic biofilm // *Water Res.* – 1997. – **31**, No 9. – P. 2243–2252.
13. Morgenroth E., Eberl H. J., Van Loosdrecht M. C. M. et al. Comparing biofilm models for a single species biofilm system // *Water Sci. Tech.* – 2004. – **49**, No 11–12. – P. 145–154.
14. Wanner O., Reichert P. Mathematical modeling of mixed-culture biofilms // *Biotechnol. Bioeng.* – 1996. – **49**(2). – P. 172–184.

Институт гидромеханики НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 30.09.2010

V. L. Polyakov

Simulation of wastewater biofiltration with low-content organic substrate. Aerobic biofilm

An approximate solution to the steady-state task concerning the operation of a biofilm has been obtained at low contents of an organic substrate in wastewater. Formulae have been deduced for the substrate concentration and transfer depending on the external flow and biofilm parameters due to the additional simplification of the solution. High accuracy of the proposed formulae has been substantiated by comparison with the exact solution when varying the parameters within wide limits.