

**Поляков В. Л., д.т.н., професор** (Інститут гідромеханіки НАН України, м. Київ), **Мартинів С. Ю., к.т.н., доцент** (Національний університет водного господарства та природокористування, м. Рівне),  
**Автаєва О. В., інженер** (Інститут гідромеханіки НАН України, м. Київ)

## **МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ АДСОРБЦІЙНОГО ЗАБРУДНЕННЯ В ЗАВАНТАЖЕННІ ЗНЕЗАЛІЗНЮВАЛЬНИХ ФІЛЬТРІВ**

**В статті наведено схему іммобілізації та трансформації форм заліза при знезалізненні підземних вод. Представлено освітлювальний блок загальної моделі фізико-хімічного знезалізнення води з врахуванням нелінійних ефектів масообміну. Окремо розглянутий блок нелінійної задачі адсорбції і трансформації закису заліза. Використовуючи метод динамічного осереднення шуканої характеристики, отримані наближені її розв'язки. Проведений кількісний аналіз змін відносних концентрацій вільного і адсорбованого двовалентного заліза та оцінена розбіжність між відповідними точними та наближеними розв'язками. Розраховано накопичення адсорбованого заліза в завантаженні.**

**Ключові слова:** підземна вода, фізико-хімічне знезалізнення, закисне залізо, зернисте завантаження, фільтрування, математичне моделювання.

**Постановка проблеми.** Україна відноситься до країн з відносно низькими запасами водних ресурсів. При цьому централізоване водопостачання, яке в найбільшій степені гарантує дотримання належної якості питної води, відсутнє в 14% селищ міського типу та 77% сіл. Враховуючи значний резерв експлуатаційних запасів підземних вод, є досить перспективним використання їх для водопостачання малих населених пунктів. Як правило, захищені підземні водоносні горизонти мають стабільні впродовж року фізико-хімічні показники якості води і найкраще відповідають вимогам до питної води. Проте, такі води досить часто мають підвищену концентрацію заліза [1, С. 178], яка здебільшого не перевищує 3,0 мг/дм<sup>3</sup> [2; 7]. Нерозуміння важливості проблеми передозування заліза й пов'язаної з нею необхідності знезалізнення води може призводити як до погіршення самопочуття людини, так і до розвитку хронічних захворювань, зниження продуктивності праці та загальної тривалості життя людини.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Залізо в природних водах може знаходитися у вигляді дво- та тривалентних іонів, колоїдів неорганічного і органічного (бактеріального) походження [2; 8; 3, С. 100], що суттєво впливає на вибір методу знезалізнення, який потрібно здійснювати пробним знезалізненням води безпосередньо біля джерела водопостачання.

Існуючі методи знезалізнення води можна розділити на безреагентні, реагентні, іонообмінні, мембранні та біохімічні [2, С. 122-164; 4, С. 48; 5, С. 9-12; 6, С. 1468-1479]. Безреагентні та реагентні методи називають ще фізико-хімічними методами, які передбачають введення окислювачів заліза. При реалізації безреагентного метода цим окислювачем є кисень повітря, а реагентного – у воду вводять речовини хімічних окислювачів (хлор, озон, перманганат калію тощо). Завданням методів є переведення розчинних форм заліза в малорозчинну форму  $Fe(OH)_3$ , що досягається завдяки їх окисленню із наступним осадженням (затриманням у товщі фільтруючого завантаження). Найчастіше використовуються безреагентні методи знезалізнення води, оскільки вони економніші та простіші в експлуатації. Для них розроблено відносно прості методи розрахунку, які, однак, не враховують ряд важливих особливостей, зокрема, нелінійні ефекти масообміну, автокаталітичність процесу, консолідацію осаду тощо.

**Метою даної роботи є** розв'язання задачі адсорбції і трансформації заліза в зернистому завантаженні освітлювальних фільтрів, як складової загальної задачі фізико-хімічного знезалізнення підземних вод, та аналіз їх деяких закономірностей.

**Результати досліджень.** Для обґрунтованого вибору раціональних конструктивних параметрів знезалізнювальних фільтрів та технологічних параметрів знезалізнення доречно використовувати методи математичного моделювання. За результатами отриманих власних експериментальних даних і спираючись на концептуальну модель О.Я. Олійника [3, С. 106] відпрацьовувалася математична модель знезалізнення, що складається з двох взаємопов'язаних блоків – освітлювального і фільтраційного (останній в даній роботі не розглядається). Пропонована двофазна математична модель передбачає наявність двох форм заліза – закисного та окисного (рис. 1). Взагалі освітлювальний блок представлений рівняннями, які описують перенос, адсорбцію та окислення закисного заліза,

$$V \frac{\partial C_a}{\partial z} + \frac{\partial S_a}{\partial t} = -k_s C_a - K_d S_a; \quad (1)$$

$$\frac{\partial S_a}{\partial t} = k_a f_a(S_a)(S_{ma} - S_a)C_a - K_d S_a, \quad (2)$$

рівняннями, які описують перенос та сорбцію гідроксиду заліза:

$$V \frac{\partial C_h}{\partial z} + \frac{\partial S_h}{\partial t} = k_s C_a + K_d S_a; \quad (3)$$

$$\frac{\partial S_h}{\partial t} = k_h (S_{mh} - S_h)C_h + K_d S_a, \quad (4)$$

а також граничними

$$z = 0, C_a = C_{a0}; \quad C_h = C_{h0}; \quad (5)$$

і початковими умовами

$$t = 0, S_a = S_a^0(z); \quad S_h = S_h^0(z). \quad (6)$$

Тут  $C_a$ ,  $C_h$  – масові або об'ємні концентрації закису та гідроксиду заліза (III) у рідкій фазі (воді);  $S_a$ ,  $S_h$  – масові або об'ємні концентрації іммобілізованого (в твердій фазі) закису та гідроксиду заліза (III);  $V$  – швидкість фільтрування;  $k_s$ ,  $K_d$  – коефіцієнти швидкостей окислення розчиненого та адсорбованого закису;  $k_a$ ,  $k_h$  – приведені коефіцієнти швидкостей адсорбції закису та сорбції гідроксиду;  $S_a^0(z)$ ,  $S_h^0(z)$  – початкові розподіли іммобілізованого закису заліза та гідроксиду;  $S_{ma}$ ,  $S_{mh}$  – граничні концентрації обох іммобілізованих форм заліза;  $f_a(S_a)$  – автокаталітична функція;  $z$  – координата по висоті завантаження;  $t$  – тривалість фільтрування.

Оскільки в підземних водах залізо знаходиться практично в закисній формі, то визначальне значення для його видалення мають фізико-хімічні трансформації саме двовалентного заліза. Вміст  $Fe^{2+}$  з часом знижується внаслідок процесів, що відбуваються паралельно – його зв'язування з елементами завантаження (адсорбція) та окислення, причому і у вільному, і у фіксованому станах. Певний вплив на адсорбційний процес має гідроксид заліза, який є його каталізатором. Проте, беручи до уваги тісний зв'язок між кількістю іммобілізованих закису та гідроксиду, виправдано вважати модель видалення двовалентного заліза автономною і після введення безрозмірних коефіцієнтів та параметрів рівнянь (1), (2), відповідних граничної і початкової умов її можна подати наступним чином:

$$\frac{\partial \bar{C}_a}{\partial \bar{z}} + \psi \frac{\partial \bar{S}_a}{\partial \bar{t}} + \psi \bar{K}_d \bar{S}_a + \bar{k}_s \bar{C}_a = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial \bar{S}_a}{\partial \bar{t}} = \bar{k}_a \bar{f}_a(\bar{S}_a)(\bar{S}_{ma} - \bar{S}_a)\bar{C}_a - \bar{K}_d \bar{S}_a, \quad (8)$$

$$\bar{z} = 0, \bar{C}_a = \bar{C}_{a0}; \quad \bar{t} = 0, \quad \bar{S}_a = \bar{S}_a^0(\bar{z}). \quad (9)$$

де  $\bar{C}_a = \frac{C_a}{C_0}$ ,  $\bar{S}_a = \frac{S_a}{S_{mh}}$ ,  $\bar{z} = \frac{z}{L}$ ,  $\bar{k}_s = \frac{L}{V} \cdot k_s$ ,  $\psi = \frac{S_{mh}}{n_0 \cdot C_0}$ ;  $C_0$  – вихідна концентрація загального заліза у воді;  $L$  – висота зернистого завантаження;  $n_0$  – початкова поруватість завантаження. Коефіцієнт  $\psi$  визначає темп зниження концентрації  $\bar{C}_a$  за глибиною, а тому, може трактуватися як параметр нерівномірності.

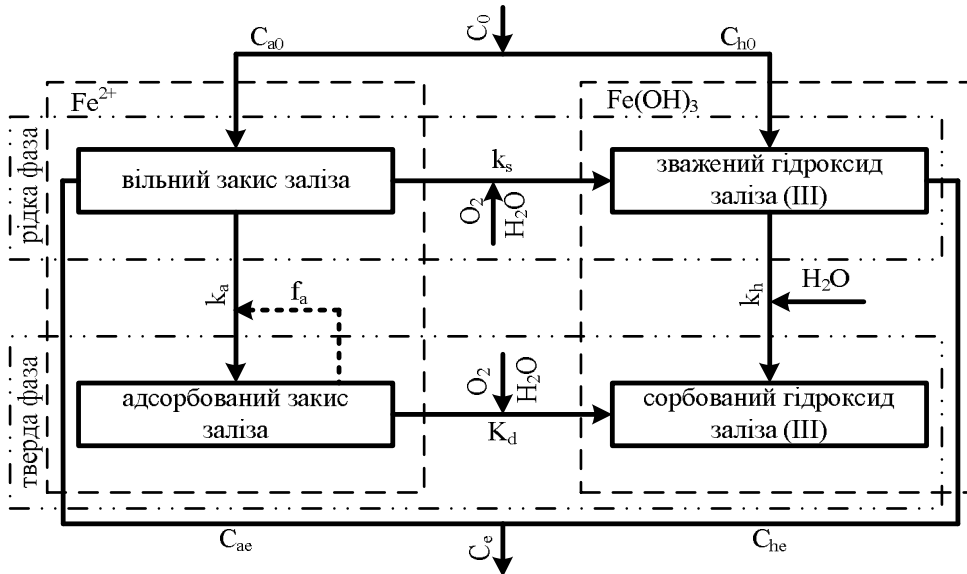


Рис. 1. Схема іммобілізації та трансформації форм заліза при фізико-хімічному знезалізненні підземних вод

Через складність строгого розв'язку блока двовалентного заліза, де одна з шуканих концентрацій виступає в ролі незалежної змінної та параметра, для обґрунтування раціональних конструктивних та технологічних параметрів доцільно користуватися простішими розрахунковими формалізмами. При цьому виправдано лише мінімальне зниження точності останніх, і, звичайно, вони повинні легко реалізовуватися з допомогою сучасних пакетів програм математичного аналізу без використання елементів програмування. Нижче наведено наближені розв'язки вихідної математичної задачі, які здатні суттєво полегшити прогноз просторово-часових змін вмісту заліза в завантаженні, а разом з тим сприяти наступному теоретичному аналізу вже тривалентного заліза у вільній та зв'язаній формах і, нарешті, втрат напору в забрудненому шарі фільтрувального мате-

ріалу.

Для розв'язання нелінійної задачі адсорбції і трансформації заліза, як складової загальної задачі фізико-хімічного знезалізнення, доцільно застосовувати прийом динамічного осереднення шуканої характеристики [7, С. 114], який особливо ефективний, якщо невідомі межі її зміни. Його суть полягає в тому, що шукана величина осереднюється за часом таким чином, що її залежність від нього частково зберігається, але при цьому істотно спрощуються операції, пов'язані з її локальним інтегруванням та диференціюванням.

Отже, приймаючи до уваги результати проведених в [8, С. 273-279] досліджень (формування осаду у вхідному перерізі завантаження), осереднюється по розрахунковому періоду  $[0, T]$  концентрація  $\bar{S}_a$  в доданку, що описує адсорбційний процес. Таким чином вводиться параметр

$$\bar{S}_{ac}(\bar{z}, T) = \frac{1}{T} \int_0^T \bar{S}_a(\bar{z}, \bar{t}) d\bar{t}$$

та рівняння масопереносу (7) при відсутності автокаталітичного ефекту прийме вигляд

$$\frac{\partial \bar{C}_a}{\partial \bar{z}} + \psi \bar{k}_a (\bar{S}_{ma} - \bar{S}_{ac}) \bar{C}_a + \bar{k}_s \bar{C}_a = 0. \quad (10)$$

Розв'язок (10) при граничній умові (9) буде

$$\bar{C}_a(\bar{z}, \bar{t}) = \bar{C}_{a0} \exp \left[ \psi \bar{k}_a \int_0^{\bar{z}} \bar{S}_{ac}(\eta, T) d\eta - (\psi \bar{k}_a \bar{S}_{ma} + \bar{k}_s) \bar{z} \right]. \quad (11)$$

Тоді з врахуванням (11) кінетичне рівняння набуває вигляду

$$\frac{\partial \bar{S}_a}{\partial \bar{t}} + \bar{K}_d \bar{S}_a = \bar{k}_a \bar{C}_{a0} [\bar{S}_{ma} - \bar{S}_{ac}(\bar{z}, T)] \cdot \exp \left[ \psi \bar{k}_a \int_0^{\bar{z}} \bar{S}_{ac}(\eta, T) d\eta - (\psi \bar{k}_a \bar{S}_{ma} + \bar{k}_s) \bar{z} \right]. \quad (12)$$

Розв'язок (12) при початковій умові (9) дає

$$\begin{aligned} \bar{S}_a(\bar{z}, \bar{t}; T) = & \bar{S}_a^0(\bar{z}) \cdot e^{-\bar{K}_d \bar{t}} + \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0}}{\bar{K}_d} [\bar{S}_{ma} - \bar{S}_{ac}(\bar{z}, T)] \cdot (1 - e^{-\bar{K}_d \bar{t}}) \cdot \\ & \cdot \exp \left[ \psi \bar{k}_a \int_0^{\bar{z}} \bar{S}_{ac}(\eta, T) d\eta - (\psi \bar{k}_a \bar{S}_{ma} + \bar{k}_s) \bar{z} \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

Для визначення  $\bar{S}_{ac}$  складається інтегральне рівняння шляхом інтегрування обох частин (13) по  $\bar{t}$  в межах від 0 до  $T$ . Тоді

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \int_0^T \bar{S}_a(\bar{z}, \bar{t}; T) d\bar{t} = \bar{S}_{ac} = & \bar{S}_a^0 \frac{1 - e^{-\bar{K}_d T}}{\bar{K}_d T} + \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0}}{\bar{K}_d T} (\bar{S}_{ma} - \bar{S}_{ac}) \left( T - \frac{1 - e^{-\bar{K}_d T}}{\bar{K}_d} \right) \cdot \\ & \cdot \exp \left[ \psi \bar{k}_a \int_0^{\bar{z}} \bar{S}_{ac}(\eta, T) d\eta - (\psi \bar{k}_a \bar{S}_{ma} + \bar{k}_s) \bar{z} \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

Із (14) випливає, що

$$\ln \frac{\bar{K}_d^2 T \bar{S}_{ac} - \bar{K}_d \bar{S}_a^0 (1 - e^{-\bar{K}_d T})}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} (\bar{S}_{ma} - \bar{S}_{ac}) (\bar{K}_d T - 1 + e^{-\bar{K}_d T})} = \psi \bar{k}_a \int_0^{\bar{z}} \bar{S}_{ac}(\eta, T) d\eta - (\psi \bar{k}_a \bar{S}_{ma} + \bar{k}_s) \bar{z}. \quad (15)$$

Найчастіше можна приймати  $\bar{S}_a^0 = const$ . Обидві частини рівняння (15) диференціюються по  $\bar{z}$ , що приводить до диференціального рівняння

$$\frac{\bar{K}_d T \bar{S}_{ma} - \bar{S}_a^0 + \bar{S}_a^0 e^{-\bar{K}_d T}}{(\bar{S}_{ma} - \bar{S}_{ac}) (\bar{K}_d T \bar{S}_{ac} - \bar{S}_a^0 + \bar{S}_a^0 e^{-\bar{K}_d T})} \frac{d\bar{S}_{ac}}{d\bar{z}} = \psi \bar{k}_a \bar{S}_{ac} - (\psi \bar{k}_a \bar{S}_{ma} + \bar{k}_s) + \frac{(1 - e^{-\bar{K}_d T})}{\bar{K}_d T \bar{S}_{ac} - \bar{S}_a^0 + \bar{S}_a^0 e^{-\bar{K}_d T}} \frac{d\bar{S}_a^0}{d\bar{z}}. \quad (16)$$

Тоді рівняння (16) при початкових умовах

$$\bar{t} = 0, \bar{S}_{ac} = \bar{S}_{ac0}(T)$$

легко розв'язується і представляється в інтегральній формі, а саме,

$$\bar{z}(\bar{S}_{ac}; T) = \int_{\bar{S}_{ac0}}^{\bar{S}_{ac}} \frac{(\bar{K}_d T \bar{S}_{ma} - \bar{S}_a^0 + \bar{S}_a^0 e^{-\bar{K}_d T}) d\zeta}{(\bar{S}_{ma} - \zeta) (\psi \bar{k}_a \zeta - \psi \bar{k}_a \bar{S}_{ma} - \bar{k}_s) (\bar{K}_d T \zeta - \bar{S}_a^0 + \bar{S}_a^0 e^{-\bar{K}_d T})}. \quad (17)$$

Початкова функція  $\bar{S}_{ac0}$  знаходиться з (14) при  $\bar{z} = 0$  і рівна

$$\bar{S}_{ac0}(T) = \frac{\bar{K}_d \bar{S}_a^0 (1 - e^{-\bar{K}_d T}) + \bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma} (\bar{K}_d T - 1 + e^{-\bar{K}_d T})}{\bar{K}_d^2 T + \bar{k}_a \bar{C}_{a0} (\bar{K}_d T - 1 + e^{-\bar{K}_d T})}. \quad (18)$$

Суттєво, що (18) встановлює однозначний зв'язок між  $\bar{z}$  та  $\bar{S}_{ac}$ . Тому не складає труднощів розрахувати інтеграл в (13). Дійсно

$$I_s(\bar{S}_{ac}) = \int_0^{\bar{z}} \bar{S}_{ac}(\eta, T) d\eta = \int_{\bar{S}_{ac0}}^{\bar{S}_{ac}} \zeta \frac{d\eta}{d\zeta} d\zeta, \quad (19)$$

де згідно (17) 
$$\frac{d\eta}{d\zeta} = \frac{\bar{K}_d T \bar{S}_{ma} - \bar{S}_a^0 + \bar{S}_a^0 e^{-\bar{K}_d T}}{(\bar{S}_{ma} - \zeta) (\psi \bar{k}_a \zeta - \psi \bar{k}_a \bar{S}_{ma} - \bar{k}_s) (\bar{K}_d T \zeta - \bar{S}_a^0 + \bar{S}_a^0 e^{-\bar{K}_d T})}.$$

Остаточно

$$\bar{S}_a(\bar{z}, \bar{t}; \bar{S}_{ac}) = \bar{S}_a^0 \cdot e^{-\bar{K}_d \bar{t}} + \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0}}{\bar{K}_d} [\bar{S}_{ma} - \bar{S}_a(\bar{z}, \bar{t}; \bar{S}_{ac})] \cdot (1 - e^{-\bar{K}_d \bar{t}}) \cdot \exp[\psi \bar{k}_a I_s(\bar{S}_{ac}) - (\psi \bar{k}_a \bar{S}_{ma} + \bar{k}_s) \bar{z}], \quad (20)$$

так що

$$\bar{S}_a(\bar{z}, \bar{t}; \bar{S}_{ac}) = \frac{\bar{K}_d \bar{S}_a^0 \cdot e^{-\bar{K}_d \bar{t}} + \bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma} (1 - e^{-\bar{K}_d \bar{t}}) \cdot \exp[\psi \bar{k}_a I_s(\bar{S}_{ac}) - (\psi \bar{k}_a \bar{S}_{ma} + \bar{k}_s) \bar{z}]}{\bar{K}_d + \bar{k}_a \bar{C}_{a0} (1 - e^{-\bar{K}_d \bar{t}}) \cdot \exp[\psi \bar{k}_a I_s(\bar{S}_{ac}) - (\psi \bar{k}_a \bar{S}_{ma} + \bar{k}_s) \bar{z}]}. \quad (21)$$

Послідовність розрахунків при визначенні  $\bar{S}_a$  наступна:

- при заданих  $\bar{z}$  та  $T$  (кінець розрахункового періоду) з (17) знаходиться відповідне їх значення параметра  $\bar{S}_{ac}$ ;

- розраховується за формулою (18) початкове значення даного параметра  $\bar{S}_{ac0}$ ;
- розраховується за формулою (19) значення параметра  $I_s$ ;
- при відомих  $\bar{z}$ , розрахунковому часі  $\bar{t}$  (дорівнює  $T$ ) та  $I_s$  за (21) визначається відповідне значення шуканої  $\bar{S}_a$ .

Виявити тенденції в накопиченні та окисненні адсорбованого двовалентного заліза дозволяє аналіз динаміки його загального вмісту в шарі завантаження  $W$ , тобто

$$W(\bar{t}) = \int_0^l \bar{S}_a(\bar{z}, \bar{t}) d\bar{z}.$$

Для встановлення закономірностей зростання та стабілізації величини  $W$  потрібно спиратися на початкову систему рівнянь (7), (8). Після їх почленного інтегрування по  $\bar{z}$  від 0 до 1 отримано

$$\frac{dW}{d\bar{t}} = \bar{k}_a \int_0^l \bar{C}_a(\bar{z}, \bar{t}) [\bar{S}_{ma} - \bar{S}_a(\bar{z}, \bar{t})] d\bar{z} - \bar{K}_d W, \quad (22)$$

$$\bar{C}_{a0} - \bar{C}_{ae} = \psi \bar{k}_a \int_0^l \bar{C}_a(\bar{z}, \bar{t}) [\bar{S}_{ma} - \bar{S}_a(\bar{z}, \bar{t})] d\bar{z} + \bar{k}_s \int_0^l \bar{C}_a(\bar{z}, \bar{t}) d\bar{z}. \quad (23)$$

З (22) та (23) випливає

$$\frac{dW}{d\bar{t}} + \bar{K}_d W = \frac{\bar{C}_{a0} - \bar{C}_{ae}(\bar{t})}{\psi} - \frac{\bar{k}_s}{\psi} \int_0^l \bar{C}_a(\bar{z}, \bar{t}) d\bar{z}. \quad (24)$$

Розв'язок (24) знаходимо при початковій умові

$$\bar{t} = 0, W^0 = W(0) = \int_0^l \bar{S}_a^0(\bar{z}) d\bar{z}$$

та має наступний вигляд

$$W(\bar{t}) = W^0 e^{-\bar{K}_d \bar{t}} + \frac{1}{\psi} \left\{ \frac{\bar{C}_{a0}}{\bar{K}_d} (1 - e^{-\bar{K}_d \bar{t}}) - \int_0^{\bar{t}} \left[ \bar{C}_{ae}(\xi) - \bar{k}_s \int_0^l \bar{C}_a(\bar{z}, \xi) d\bar{z} \right] e^{-\bar{K}_d(\bar{t}-\xi)} d\xi \right\}. \quad (25)$$

Як правило,  $\bar{C}_{a0} \gg \bar{C}_{ae}$ , що дає можливість суттєво спростити (25), а саме

$$W(\bar{t}) = W^0 e^{-\bar{K}_d \bar{t}} + \frac{\bar{C}_{a0}}{\psi \bar{K}_d} (1 - e^{-\bar{K}_d \bar{t}}) - \frac{\bar{k}_s}{\psi} \int_0^{\bar{t}} \int_0^l e^{-\bar{K}_d(\bar{t}-\xi)} \bar{C}_a(\bar{z}, \xi) d\bar{z} d\xi. \quad (26)$$

Нарешті, оскільки  $\bar{k}_s \ll \bar{K}_d$ , то виправдано в (26) замість  $\bar{C}_a(\bar{z}, \bar{t})$  використовувати профіль  $\bar{C}_a^0(\bar{z})$ , який формується зразу після проходження фронту забруднення через шар завантаження, а саме,

$$\bar{C}_a^0(\bar{z}) = \bar{C}_{a0} e^{-\psi \bar{k}_a \bar{S}_{ma} \bar{z}}.$$

Тоді

$$W(\bar{t}) = W^0 e^{-\bar{k}_d \bar{t}} + \frac{\bar{C}_{a0}}{\psi \bar{K}_d} \left(1 - e^{-\bar{k}_d \bar{t}}\right) \left[1 - \frac{\bar{k}_s}{\bar{k}_a \bar{S}_{ma}} \left(1 - e^{-\psi \bar{k}_a \bar{S}_{ma}}\right)\right]. \quad (27)$$

Доречно зауважити, що темпи зміни з часом концентрації  $\bar{S}_a$ , причому на різних глибинах, та вмісту  $W$  можуть суттєво відрізнятися. Зокрема, у вихідному перерізі завантаження швидкість накопичення осаду, яка згідно з локальним точним розв'язком визначаються показником степеня  $\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d$ , виявляється більше аналогічної величини з (27). На кінцевій ділянці завантаження картина буде протилежною.

Додатково врахувати автокаталітичний ефект, причому без суттєвого ускладнення формалізмів, можливо шляхом узагальнення коефіцієнта  $\bar{k}_a$ . Для цього достатньо в розрахункових формалізмах вказаний коефіцієнт замінити на  $\tilde{k}_a(\bar{S}_{acc})$ . У першому наближенні згідно з [8, С. 275] можна вважати, що вони пов'язані лінійним чином, тобто

$$\tilde{k}_a = \bar{k}_a \cdot (1 + \theta \bar{S}_{acc}), \quad (28)$$

де

$$\bar{S}_{acc} = \frac{1}{T} \int_0^T \int_0^1 \bar{S}_a(\bar{z}, \bar{t}; \bar{S}_{ac}) d\bar{t} d\bar{z}. \quad (29)$$

Оскільки,  $\tilde{k}_a$  також є постійною величиною, то формули (11), (21) після заміни в ній  $\bar{k}_a$  на  $\tilde{k}_a$  виявляються справедливими і при наявності вищезгаданого ефекту. Подвійне інтегрування двох частин рівняння (21) по  $\bar{z}$  в межах від 0 до 1 і по  $\bar{t}$  від 0 до  $T$  (розрахунковий час) дозволяє вивести рівняння відносно величини  $\bar{S}_{acc}$ , яку потім потрібно використовувати в (28) для уточнення коефіцієнта  $\bar{k}_a$ . Збільшення останнього якраз і відобразить підсилення (ад)сорбційного процесу під впливом осаду, що утворився.

Наведені вище результати досліджень аналітичними методами динаміки закисного заліза ілюструються розрахунками ряду прикладів. Предметом кількісного аналізу стали відносні концентрації вільного і адсорбованого двовалентного заліза. Базовий набір значень модельних параметрів відображає реальні умови, які складаються на експериментальних установках при фізико-хімічному знезалізненні та включають:  $\bar{C}_{a0} = 0.5$ ,  $\bar{S}_{ma} = 0.2$ ,  $\psi = 5000$ ,  $\bar{k}_a = 0.005$ ,  $\bar{K}_d = 0.001$ ,  $\bar{k}_s = 0.002$ . Внаслідок тісного зв'язку між концентраціями  $C_a$  та  $S_a$  адсорбований закис заліза головним чином накопичується



поблизу вихідного перерізу. Відповідні профілі  $\bar{S}_a(\bar{z})$  на різні моменти часу показані на рис. 2. Точні профілі (1, 3) розраховані з використанням строгого розв'язку задачі (7)-(9), який тут не наводиться через його складність і буде предметом детального обговорення в подальшому, а наближені (2, 4) – за формулою (21).

Розбіжність між відповідними точними та наближеними кривими з часом не збільшується та в процентному вираженні складає 5...15%. Тривалість розрахункового періоду в даному прикладі ( $\bar{t} \leq 1000$ ) суттєво перевищує тривалість робочого періоду ( $\bar{t} \leq 600...500$ ). Виявлені обчислювальні похибки внаслідок наближеного розв'язку математичної задачі можна не приймати до уваги також і тому, що окислення адсорбованого заліза є лише одним з двох шляхів накопичення забруднення в осаді. Таким чином, розв'язок, виражений залежностями (17), (21), може бути корисним і для наступного аналізу динаміки вже тривалентного заліза.

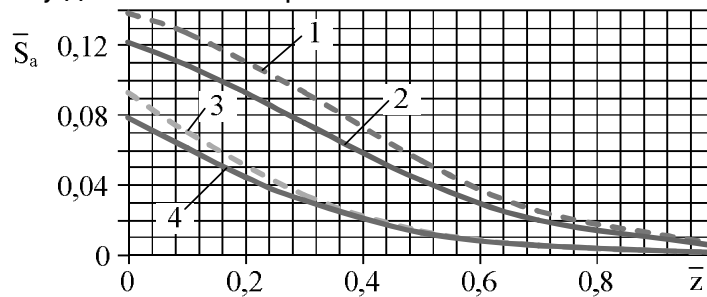


Рис. 2. Профілі відносної концентрації адсорбованого двовалентного заліза: 1, 3 – точний розрахунок; 2, 4 – наближений; 1, 2 –  $\bar{t} = 1000$ ; 3, 4 –  $\bar{t} = 300$

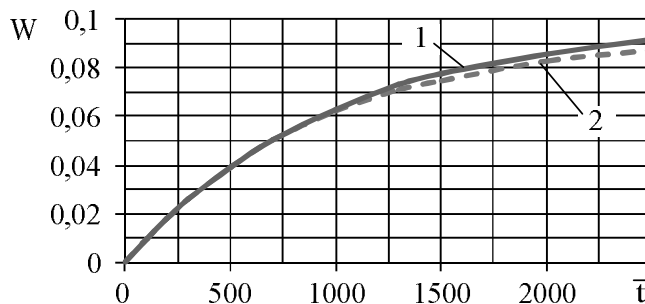


Рис. 3. Зростання відносного загального вмісту адсорбованого заліза в завантаженні з часом: 1 – наближений розрахунок; 2 – точний

І нарешті розраховано накопичення адсорбованого заліза в завантаженні. Криві зростання з часом його загального вмісту отримані з використанням точної і наближеної (27) формул, базової почат-

кової інформації та показані на рис. 3. Тут криві починають помітно розходитися тільки після приблизно  $\bar{t} = 1500$ , а до кінця розрахункового періоду ( $\bar{t} = 3000$ ) різниця досягає 5,7%.

**Висновки.** Розроблено математичну модель фізико-хімічного знезалізнення підземних вод з виділенням закисної та окисної форм заліза і врахуванням нелінійних ефектів масообміну, обумовлених обмеженістю адсорбційного та сорбційного ресурсу, інтенсифікацією видалення заліза під впливом накопиченого в поровому просторі осаду та безвідривного фільтрування. Для розв'язання нелінійної задачі адсорбції і трансформації закису заліза, як складової загальної моделі, застосований метод динамічного осереднення шуканої характеристики. Отримані наближені розв'язки математичної моделі задачі здатні суттєво полегшити прогноз просторово-часових змін концентрації закису заліза в завантаженні. Це дозволить значно спростити подальший теоретичний аналіз тривалентного заліза у вільній і зв'язаній формах та втрат напору в забрудненому зернистому шарі.

1. Поляков В. Л., Мартинов С. Ю. До теорії фізико-хімічного знезалізнення підземних води та її інформаційного забезпечення. *Чиста вода. Фундаментальні, прикладні та промислові аспекти* : матеріали V Міжнародної науково-практичної конференції. К. : Видавничий дім «КІЙ», 26-27 жовтня 2017 р. С. 178–181. 2. Очищення природної води на пінополістирольних фільтрах : монографія / С. Ю. Мартинов, А. М. Орлова та ін. ; за заг. редакцією В. О. Орлова. Рівне : НУВГП, 2012. 172 с. 3. Тугай А. М., Олійник О. Я., Тугай Я. А. Продуктивність водозабірних свердловин в умовах кольматажу : монографія. Харків : ХНАМГ, 2004. 240 с. 4. Gruett G. Removing Problem Iron / G. Gruett // *Water Technology*. 1993. V. 16(3). P. 48–51. 5. Sharma S. K. Adsorptive Iron Removal from Groundwater : Dissertation for Degree of Doctor / S. K. Sharma – Delft, The Netherlands, 2009. 202 p. 6. *Water Treatment Handbook, 7th Edition. – 2 Volume Set. – Hardcover* : Publisher : Lavoisier, 2007. 1904 p. 7. Поляков В. Л., Мартынов С. Ю. О математическом моделировании физико-химического обезжелезивания подземных вод с учетом нелинейных эффектов. *Ресурс і безпека експлуатації конструкцій, будівель та споруд* : тези за матеріалами VIII Міжнародної наукової конференції. Х. : ХНУБА, 18-19 жовтня 2017 р. С. 113–115. 8. Поляков В. Л., Мартинов С. Ю. Математичне моделювання динаміки накопичення сполук заліза у вхідному перерізі завантаження фільтра. *Проблеми водопостачання, водовідведення та гідравліки* : науково-технічний збірник. 2017. К. : ХНУБА. Випуск 28. С. 272–280.

#### REFERENCES:

1. Poliakov V. L., Martynov S. Yu. Do teorii fizyko-khimichnoho znezaloznennia

pidzemnykh vody ta yii informatsiinoho zabezpechennia. Chysta voda. Fundamentalni, prykladni ta promyslovi aspekty : materialy V Mizhnarodnoi naukovo-praktychnoi konferentsii. K. : Vydavnychi dim «KYI», 26-27 zhovtnia 2017 r. S. 178–181. **2.** Ochyshchennia pryrodnoi vody na pinopolistyrolnykh filtrakh : monohrafiia / S. Yu. Martynov, A. M. Orlova ta in. ; za zah. redaktsiieiu V. O. Orlova. Rivne : NUVHP, 2012. 172 s. **3.** Tuhai A. M., Oliinyk O. Ya., Tuhai Ya. A. Produktyvnist vodozabirnykh sverdlovin v umovakh kolmatazhu : monohrafiia. Kharkiv : KhNAMH, 2004. 240 s. **4.** Gruett G. Removing Problem Iron / G. Gruett // Water Technology. 1993. V. 16(3). P. 48–51. **5.** Sharma S. K. Adsorptive Iron Removal from Groundwater : Dissertation for Degree of Doctor / S. K. Sharma – Delft, The Netherlands, 2009. 202 p. **6.** Water Treatment Handbook, 7th Edition. – 2 Volume Set. – Hardcover : Publisher : Lavoisier, 2007. 1904 p. **7.** Poliakov V. L., Martynov S. Yu. O matematycheskom modelirovanny fyzyko-khymycheskoho obezshelezyvanyia podzemnykh vod s uchetom nelyneinykh efektov. Resurs i bezpeka ekspluatatsii konstruksii, budivel ta sporud : tezy za materialamy VIII Mizhnarodnoi naukovo konferentsii. Kh. : KhNUBA, 18-19 zhovtnia 2017 r. S. 113–115. **8.** Poliakov V. L., Martynov S. Yu. Matematychno modeliuвання dynamiky nakopychennia spoluk zaliza u vkhidnomu pererizi zavantazhennia filtra. Problemy vodopostachannia, vodovidvedennia ta hidravliky : naukovo-tekhnichnyi zbirnyk. 2017. K. : KNUBA. Vypusk 28. S. 272–280.

Рецензент: д.т.н., професор Ковальчук В. А. (НУВГП)

---

**Poliakov V. L., Doctor of Engineering, Professor** (Institute of Hydromechanics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv)  
**Martynov S. Yu., Candidate of Engineering (Ph.D.), Associate Professor** (National University of Water and Environmental Engineering, Rivne),  
**Avtaieva O. V., Engineer** (Institute of Hydromechanics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv)

## **MATHEMATICAL MODELING OF ADSORPTION POLLUTION IN DOWNLOADING OF DEFERRIZATION FILTERS**

**In the article the scheme of immobilization and transformation of iron forms is presented for underground water deferrization. The clarification block of the general model of physico-chemical deferrization of water is presented, taking into account the nonlinear effects of mass exchange. Separately the block of nonlinear problem of adsorption and transformation of iron oxide is considered. Using the method of dynamic averaging of the desired characteristic,**

**approximate solutions are obtained. Executed the quantitative analysis of changes of the relative concentrations of free and adsorbed ferrous iron and the discrepancy between the corresponding exact and approximate solutions is estimated. The accumulation of adsorbed iron in the download is calculated.**  
**Keywords:** underground water, physico-chemical deferrization, ferrous iron, grainy downloading, filtration, mathematical modeling.

---

**Поляков В. Л., д.т.н., профессор** (Институт гидромеханики НАН Украины, г. Киев), **Мартынов С. Ю., к.т.н., доцент** (Национальный университет водного хозяйства и природопользования, г. Ровно), **Автаева О. В., инженер** (Институт гидромеханики НАН Украины, г. Киев)

## **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АДСОРБЦИОННОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ В ЗАГРУЗКЕ ОБЕЗЖЕЛЕЗИВАЮЩИХ ФИЛЬТРОВ**

**В статье приведена схема иммобилизации и трансформации форм железа при обезжелезивании подземных вод. Представлен осветительный блок общей модели физико-химического обезжелезивания воды с учетом нелинейных эффектов массообмена. Отдельно рассмотрен блок нелинейной задачи адсорбции и трансформации закиси железа. Используя метод динамического осреднения искомой характеристики, полученные приближенные ее решения. Проведен количественный анализ изменений относительных концентраций свободного и адсорбированного двухвалентного железа и оценено расхождение между соответствующими точными и приближенными решениями. Рассчитано накопления адсорбированного железа в загрузке.**

**Ключевые слова:** подземные воды, физико-химическое обезжелезивание, закисное железо, зернистая загрузка, фильтрация, математическое моделирование

---