

Рівненський державний гуманітарний університет

Факультет математики та інформатики

Кафедра вищої математики

Кваліфікаційна робота

магістерського рівня

на тему:

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СИНГУЛЯРНО ЗБУРЕНИХ  
ПРОЦЕСІВ ОЧИЩЕННЯ ПІДЗЕМНИХ ВОД ВІД СПОЛУК МЕТАЛІВ  
НА БІОРЕАКТОРАХ**

Виконала: студентка II курсу магістратури,

групи М-М-21

спеціальності 014 Середня освіта (Математика)

Рибак Галина Миколаївна

Керівник: *к.т.н., доц. Присяжнюк І. М.*

Рецензент *д.т.н., проф. Сафоник А. П.*

Рівне – 2021 року

## ЗМІСТ

ВСТУП .....	4
РОЗДІЛ I. АНАЛІЗ СТАНУ ЗАБРУДНЕННЯ ВОДИ ТА МЕТОДІВ ЇЇ ОЧИСТКИ.....	7
1.1. РІВЕНЬ ЗАБРУДНЕННЯ ПРІСНИХ ВОД В УКРАЇНІ І СВІТІ ТА НАСЛІДКИ ВІД ЇЇ СПОЖИВАННЯ.....	7
1.2. ОЗНАЧЕННЯ ВОДОПІДГОТОВКИ ТА ОСНОВНІ МЕТОДИ ПЕРВИННОГО ОЧИЩЕННЯ ПРІСНИХ ВОД.....	15
1.3. ВИБІР МЕТОДУ ОЧИСТКИ ПІДЗЕМНИХ ВОД.....	19
РОЗДІЛ II. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ОЧИЩЕННЯ ПІДЗЕМНИХ ТА СТІЧНИХ ВОД НА БІОЛОГІЧНОМУ РЕАКТОРІ.....	34
2.1. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ОЧИЩЕННЯ ПІДЗЕМНИХ ТА СТІЧНИХ ВОД ВІД СПОЛУК МЕТАЛІВ НА БІОРЕАКТОРІ.....	34
2.2. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ БІОЛОГІЧНОЇ ОЧИСТКИ ПІДЗЕМНИХ ВОД ВІД СПОЛУК МЕТАЛІВ НА БІОЛОГІЧНОМУ РЕАКТОРІ З УРАХУВАННЯМ ВПЛИВУ НЕОРГАНІЧНОГО ВУГЛЕЦЮ .....	42
2.3. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ БІОЛОГІЧНОЇ ОЧИСТКИ ПІДЗЕМНИХ ВОД ВІД СПОЛУК МЕТАЛІВ НА БІОЛОГІЧНОМУ РЕАКТОРІ З УРАХУВАННЯМ ВПЛИВУ ДОПОМІЖНОГО ДЖЕРЕЛА КИСНЮ .....	45
2.4. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СИНГУЛЯРНО ЗБУРЕНИХ ПРОЦЕСІВ ЗНЕЗАЛІЗНЕННЯ ВОД .....	54
РОЗДІЛ III. МЕТОДОЛОГІЧНІ ОСНОВИ ВИКЛАДАННЯ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ СИНГУЛЯРНО ЗБУРЕНИХ ПРОЦЕСІВ ОЧИЩЕННЯ ПІДЗЕМНИХ ВОД НА БІОРЕАКТОРАХ В РАМКАХ РОБОТИ У КЛАСАХ З ПОГЛИБЛЕНИМ ВИВЧЕННЯМ МАТЕМАТИКИ.....	58
3.1. ПРИКЛАДНЕ ЗАСТОСУВАННЯ ДРЧП В ШКІЛЬНОМУ КУРСІ МАТЕМАТИКИ СТАРШИХ КЛАСІВ ТА ГУРТКАХ МАН.....	58

3.2. ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ ПРО РЕГУЛЯРНО ТА СИНГУЛЯРНО ЗБУРЕНІ МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ.....	61
3.3. АСИМПТОТИЧНІ МЕТОДИ У ТЕОРІЇ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ. ПОГРАНШАРОВІ ПОПРАВКИ. ....	69
3.4. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ БОЛОГІЧНОЇ ОЧИСТКИ ПІДЗЕМНИХ ВОД ВІД СПОЛУК ВАЖКИХ МЕТАЛІВ НА БІОРЕАКТОРІ ЗА ДОПОМОГОЮ ПАКЕТУ MATHCAD.....	75
ВИСНОВКИ .....	83
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	84

## ВСТУП

Оскільки діяльність людини має глобальний масштаб, то антропогенне навантаження на навколишнє середовище зростає в геометричній прогресії. У промисловій галузі споживаються всі природні ресурси, проте технології їх використання недосконалі. Внаслідок чого різними відходами забруднюється атмосфера, гідросфера, літосфера тощо. Захист довкілля від забруднення став одним із найбільш важливих завдань людства поряд з таким як роззброєння, війни та миру [11].

**Актуальність теми.** Вода є важливою складовою всіх живих організмів, без неї неможливе виживання і розвиток людини в цілому. Крім гострої потреби підтримувати важливі функції організму, людина також споживає велику кількість прісної води для підтримки сільського господарства та задоволення різноманітних побутових потреб. Водні ресурси займають більше 70% земної поверхні, що становить близько 1/4400 загальної маси Землі, але частка прісної води становить менше 3% її загальної кількості, 70% якої знаходиться у вигляді льодовиків, що значною мірою ускладнює її використання [1].

Звичайно, більш доступні 30% прісної води великі за обсягом і їх нелегко вичерпати. Проте стрімкий сучасний розвиток суспільства спричинив чимало проблем. Однією з них є нестача чистої, придатної для споживання води, яка набуває глобальних масштабів. Така ситуація виникла через низку причин і з року в рік стала однією з головних проблем людства. Насамперед, у зв'язку зі збільшенням кількості населення світу та стрімким розвитком водоспоживаючих галузей і господарств продовжує зростати потреба в прісній воді [2]. По-друге, через забруднення з навколишнього світу, пов'язане з діяльністю людини, наявні запаси скорочуються. У хімічному складі підземних вод, що в основному використовуються для питного водопостачання України, спостерігаються високі концентрації сполук металів.

Дозволена санітарна норма становить  $0,2 \text{ мг/дм}^3$ , але в більшості випадків поділлка сягає від  $5 \text{ мг/дм}^3$ , що не є позитивною динамікою [2].

Тому в даний час, коли питання якісного водопостачання загострюється через нестачу чистої прісної води, тема магістерської роботи є актуальною.

Також не менш важливим питанням є підняття інтересу учнів до вивчення та розв'язування задач прикладного спрямування, оскільки вдосконалення методики вивчення теми диференціальних рівнянь з частинними похідними, сингулярно збурених задач, добір цікавих та прикладних завдань завжди буде актуальним дидактичним питанням математики [7].

**Метою даної магістерської роботи** є аналіз та розв'язування математичної моделі процесу біологічної очистки вод підземних горизонтів з високим вмістом важких металів та добір методичних матеріалів, що допоможуть вчителю при роботі з обдарованими учнями.

З цією метою були поставлені такі **завдання** дослідження:

- провести дослідження рівня забруднення прісних вод в Україні та світі і розглянути наслідки від споживання такої води;
- дати означення поняття водопідготовки та проаналізувати основні методи очистки підземних вод;
- проаналізувати сингулярно збурену математичну модель процесів очищення підземних вод на біологічному реакторі;
- описати методичні рекомендації та підібрати матеріали, що допоможуть обдарованим учням при вивченні задач прикладного характеру;
- представити приклад комп'ютерного моделювання процесів очистки підземних вод від сполук металів та аналізу результатів, отриманих при розв'язанні даної моделі в середовищі MathCAD.

**Об'єкт дослідження** – процес очистки на біологічному реакторі підземних вод від сполук металів.

**Предмет дослідження** – це задача Коші для нелінійної системи ДРЧП 1-го порядку, які зображують процес очистки води від йонів металів на біологічному реакторі.

**Методи досліджень** – математичне моделювання процесів очистки підземних вод від сполук тяжких металів, методи математичної фізики, чисельно-аналітичні та числові методи, аналіз результатів числових експериментів.

**Апробація результатів дослідження.** За результатами роботи було підготовлено доповідь на звітній науковій конференції викладачів, співробітників і здобувачів вищої освіти Рівненського державного гуманітарного університету за 2020 рік.

Також за результатами проведених досліджень було двічі опубліковано тези доповіді на XIV Міжнародній конференції "Наука, освіта, суспільство очима молодих".

## **РОЗДІЛ І. АНАЛІЗ СТАНУ ЗАБРУДНЕННЯ ВОДИ ТА МЕТОДІВ ЇЇ ОЧИСТКИ**

### **1.1. Рівень забруднення прісних вод в Україні і світі та наслідки від їх споживання**

Якщо пригадати основні події ХХ ст., то його можна описати як боротьбу за нафту та природній газ, проте в сучасному світі ХХІ ст. постає гостра конкуренція за чисту питну воду. За даними ООН нині понад 10% населення нашої земної кулі не мають доступу до води, придатної для споживання. Критична ситуація переважно спостерігається в районах із сухим кліматом, таких як країни Середньої Азії, Північна Африка, Близький Схід тощо [12]. Переважно найбільше потерпають країни «третього світу», де сумна статистика показує, що понад 80% хвороб виникають внаслідок нестачі та забруднення прісних вод. Це в свою щороку призводить до близько 3 мільйонів летальних випадків. Жертвами в основному, на превеликий жаль, стають новонароджені та малі діти [11].

Неякісна вона підвищує ймовірність захворювання такими хворобами як чума, холера, трахома, дизентерія, висипний та черевний тиф, а також інших хвороб, які нещадно забирають людські життя [23].

Військові конфлікти, складна політична ситуація, економічна нестабільність в свою чергу ще більше ускладнюють ситуацію з недоступністю чистої та придатної для споживання води, дефіцит якої несе не лише пряму загрозу, а й безпосередньо впливає на безпеку та рівень життя людей. Всі ці чинники можуть призвести до світової продовольчої кризи.

Згідно статистичних даних для того, щоб виростити 1 т зернових культур необхідно понад 1000 т прісної води, яка відповідає санітарним нормам. Це вказує на те, що галузь рослинництва споживає великі об'єми прісної води. Не менший показник споживання води і в галузі тваринництва. Як наслідок

піднімаються ціни на агрокультури та м'ясну продукцію, що не є позитивною динамікою [11].

Майже 70% прісної води, яка доступна для людського використання, відводиться на с/г, ще 22% припадає на промисловість, і всього лише 8% залишається домогосподарствам. Беручи до уваги те, як швидко людство «випиває» водні ресурси, що знаходяться у його використанні, а також враховуючи той факт, що до 2050 року кількість населення нашої планети може досягти позначки в 9 мільярдів, – цифра залишає бажати кращого [26].

Прогнозується, що понад половина людського населення Землі до 2025 року потерпатиме через дефіцит прісних вод. Показник нестачі в 2050 році може сягнути позначки 2 млрд метрів кубічних на рік [2].

Тотальною загрозою для людей вважається виснаження та зниження якості водних ресурсів, які в свою чергу є джерелами прісної, придатної для споживання води, що є основним елементом, який забезпечує життєдіяльність на Землі. Орієнтовно через 30 років  $\frac{1}{2}$  населення нашої планети потерпатиме через дефіцит води. Проте Україну цей момент спіткати значно раніше. А жителі 1228 населених пунктів нашої держави, які забезпечуються привізною водою, вже з ним стикнулися. На даний момент в Україні фактично відсутні поверхневі водойми, які за рівнем забруднення, мікробіологічними та санітарно-хімічними ознаками, а також екологічним станом можна віднести до першої категорії водойм, які придатні для питного споживання.

Згідно даних Всесвітньої організації охорони здоров'я, 25% людства знаходиться в зоні ризику захворювань, спричинених споживанням неякісної прісної води. Орієнтовно для 75% українців джерелом питних вод є відкриті водойми, а 6% водопроводів не підлягають критеріям санітарних норм, оскільки в них немає зон санітарної охорони, необхідного комплексу очисних споруд та пристроїв, що використовуються для знезараження. Як наслідок, дана проблема постійно загострюється.



Найкритичніша ситуація на даний момент спостерігається у Луганській області, де близько 24% від загальної кількості водопроводів не підлягають відповідним санітарним нормам. У Донецькій області цей показник становить 17%, Полтавській - 13%, Івано-Франківській – 12%, Херсонській - 16%, Житомирській - 12%, Кіровоградській 11%. Безперервні відхилення від санітарно-гігієнічних норм якості прісної води, придатної для споживання, також фіксуються у Кіровоградській, Сумській, Одеській, Дніпропетровській, Миколаївській, Херсонській областях. За бактеріологічними показниками - у Закарпатській, Луганській, Тернопільській областях [28]. Це все призводить до підвищення захворюваності серед українців, що вживають неякісну питну воду. Внаслідок чого все частіше реєструються спалахи захворювань на гострі інфекційні захворювання, пов'язані із споживанням недоброякісної води. Сумна статистика показує, що 71,6% всіх постраждалих – це діти.

Українські водні об'єкти в основному забруднюються сполуками нітрогену, нафтопродуктами, органічними речовинами, фенолами та важкими металами. Найвищий показник забруднення спостерігається в басейнах таких річок як Сіверський Донець, Приазов'я, Західний Буг. Середній річний показник ключових забруднювачів у води рік Кринка, Полтва, Західний Буг, Уди, Кальміус, Кальчик, Лопань, Булавін, Бахмут, Міус, Лугань, Кривий Торець перевищує гранично допустимі норми [1].

В Україні найвищий показник забруднення водою простежується у басейні річки Дніпра. Схоже явище спостерігається на півдні країни, де основна частина прісної питної води постачається із зовнішніх джерел. Притоки Дніпра в основному забруднюються нафтопродуктами, фенолами, а також сполуками тяжких металів. На даний момент найбільш забрудненими є річки Устя, Тетерів, Горинь, Случ, скільки вони розташовані поряд з промисловими містами.

Найбільше забруднених скидів скидають у Донецькій та Дніпропетровській областях. У Харківській, Луганській та Одеській областях

це показник також залишається високим. Найкритичніша ситуація у річок Придністров'я, Кальміус, Дніпро, Міус, а також Чорного та Азовського морів [2].

Високий рівень техногенного навантаження на водойми, використання несучасних методів водопідготовки спричиняють потрапляння у питну воду органічних та неорганічних забруднювачів у великому обсязі, що не досить позитивно впливає на здоров'я та життя людей [30]. Через нестачу вмісту заліза, фтору, йоду у воді, потерпає населення західних регіонів України. А внаслідок високого вмісту нітратів та підвищену мінералізацію вод страждають люди, що проживають у південних регіонах. Зокрема дана проблема спіткала жителів сільських районів [12].

Проблема забруднення підземних горизонтів спричиняється також і через хімічне та бактеріальне забруднення ґрунтових вод. У понад половини сільських колодязів проби води не відповідають санітарно-гігієнічним нормам.

Окрім штучного (антропогенного) забруднення водних джерел розрізняють також природне. За статистикою навіть у малолюдних районах, таких як Амазонка, Аляска тощо, чистота питної води знижується, А кількість мулу та домішок різних видів невпинно збільшується від витoku, що знаходиться в горах, до місця впадання в море чи океан [11].

Таблиця 1.1. Види забруднення прісних вод [11].

<b>Вид забруднення</b>	<b>Забруднюючі речовини</b>
<b>Хімічне</b>	Тяжкі метали, луги, кислоти, нафта і нафтопродукти, мінеральні солі, пестициди, мийні засоби, канцерогени, синтетичні поверхнево-активні речовини, мінеральні добрива
<b>Фізичне</b>	Нерозчинні домішки - великі за об'ємом завислі частинки (діаметр яких близько 0,1 мм) та у вигляді суспензії, емульсії і піни (частинки діаметром від 0,1 мм до 0,1 мкм);
<b>Радіоактивне</b>	Радіонукліди (Ванадій (V) – 50, Цезій (Cs) - 137, калій (K) – 40, стронцій (Sr) -90 і т. д.)
<b>Біологічне</b>	Спори грибів, різні види мікроорганізмів (бактерії, віруси), яйця гельмінтів тощо.
<b>Теплове</b>	Підігріті води теплових та атомних електростанцій

Істотною є та обставина, що біологічне забруднення підземних горизонтів набуває великих масштабів, подекуди за рівнем небезпеки випереджаючи навіть хімічне. Досить часто це трапляється тоді, коли вода стає середовищем для існування патогенних мікроорганізмів, популяція яких у ній постійно зростає [19]. Якщо перед вживанням така вода не піддається очистці, то навіть у малих кількостях вона може спричинити спалах хвороб, які передаються через недоброякісну воду.

Основних джерел забруднення прісних вод досить багато, проте назвемо основні з них [2]:

- стоки промислових об'єктів;
- побутові стічні води комунальних господарств;
- стоки с/г;
- стічні води рудників нафтопромислів та шахт;
- виробничі відходи від видобутку різних типів корисних копалин;

- виробничі відходи в деревообробній промисловості;
- водні стоки різних видів транспорту і т. д.

### **Наслідки від забруднення водної оболонки Землі**

Основним наслідком забруднення водних горизонтів є те, що при потраплянні у водойми, забрудники значно знижують якість води [1].

Якість води – це комплекс біологічних, хімічних, бактервальних та фізичних показників, які визначають придатність для споживання у побуті, виробництві тощо.

Вона виявляється у зміні фізико-хімічних властивостей води (кислотність, запах, прозорість, вміст отруйних речовин, присмак тощо), а також у зниженні вмісту кисню, видового складу і кількості мікроорганізмів, появи бактерій, що спричиняють різного виду захворювання [11].

Отже, забруднення водних горизонтів може призвести до негативних наслідків. Вода може стати непридатною для споживання, купання, а іноді і для технічних потреб. Відомо, що вода, яка не відповідає санітарно-гігієнічним нормам, не може використовуватися і в промисловості, тому що порушує звичайний хід технологічного процесу, зменшується рівень якості вихідної продукції.

З проблемою дефіциту якісної прісної води, що підлягає всім санітарним нормам стикнулися всі природогосподарські галузі світу. Не обійшла осторонь ця проблема і нашу державу.

Загальний обсяг водних ресурсів України становить 52 км<sup>3</sup>/рік, із них 39 км<sup>3</sup>/рік становлять поверхневі води і до 13 км<sup>3</sup>/рік – підземні води. В результаті водопостачання в Україні з позначкою 30 – 36 км<sup>3</sup>/рікстрімко прямує до категорії ресурсів. Понад 88% основних рік нашої держави перебувають в поганому, дуже поганому або ж катастрофічному стані, а 61% – перебувають в статусі сильно забруднених. І всього на всього 3% українських річок перебувають в задовільному стані [2].

Найбільшими джерелами забруднення і одночасно основними споживачами водних ресурсів є побутове та сільське господарства, промисловість. Зі свого боку основні форми забруднення можна класифікувати як хімічне, фізичне, теплове та біологічне [12].

Під час фізичного забруднення у водні джерела потрапляють домішки, які досить погано розчиняються, такі як глина, пісок або різноманітне сміття.

Теплове забруднення, як правило, розглядають як окремий вид, тому що, на відміну від фізичного забруднення, основним забрудником є теплова енергія, яка, в свою чергу, побічно впливає на природу [11]. Коли водойма підігрівається, то в ній змінюються всі біологічні процеси, а це може призвести до незворотних наслідків, таких як загибель водних мешканців або ж до активного збільшення популяції найпростіших організмів чи водоростей [9].

Під час хімічного забруднення у водойми потрапляють різного виду хімічні речовини, специфічні для окремих галузей сільського господарства та промисловості або виробництва. Особливу увагу слід приділити забрудненню сполуками важкими металами, нафтопродуктами, нітратами та поверхнево-активними речовинами, основним джерелом яких є водні стоки добрив сільського господарства.

Якщо ж розглядати біологічне забруднення, то мова йде про засмічення водойм мікроорганізмами (зокрема хвороботворними і паразитичними) і органічними речовинами.

Для водопостачання нашої держави як правило використовується води підземних горизонтів. Вони більш захищені від зовнішніх джерел забруднення, відповідно на відміну від поверхневих вод їхній хімічний склад більш стабільний. Але завдяки антропогенному впливу людини на навколишнє середовище та природним чинникам, дане джерело прісної води налічує високий вміст різних сполук, зокрема металів. Згідно встановлених санітарно-гігієнічних норм допустимою вважається концентрація вмісту

сполук Феруму  $0,3 \text{ мг/л}$  води. Проте нерідко ця позначка сягає  $5 \text{ мг/дм}^3$ , а то й більше  $20 \text{ мг/дм}^3$ .

Досить поширене стало явища, коли трохи відстоявшись, ніби чиста і прозора вода, стає державою та каламутною (рис. 1.1). Це основна ознака того, що дана рідина містить велику концентрацію двовалентного заліза.



Рис.1.1. Вода із високим вмістом заліза

Відомо, що залізо (*Fe*) відноситься до найпоширеніших хімічних елементів у природі. Його можна зустріти у переважній більшості вулканічних порід, а також воно є у складі порід, які це монтують пісковики.

В першу чергу від великої концентрації вмісту Ферму у воді страждають побутові прилади, але не меншої шкоди отримує людина. Незважаючи на те, що залізо входить до переліку важливих елементів живих організмів, завдяки якому відбувається обмін кисню в організмі, виводиться вуглекислий газ і т. д., проте його надмірна концентрація в організмі може викликати безліч проблем. Слід зазначити, що засвоєння згоди металів досить складний процес. Якщо випадки прийому води із високим вмістом Ферму одиничні, то як таких побічних ефектів не буде. Саме тому частина населення України вважає, що наслідки споживання води із змістом металів досить перебільшені. Проте

наукові дослідження багатьох вчених показують протилежний факт, вони переконані що збільшення норми заліза в прісній воді — це досить серйозна небезпека для людського організму.

Безпечний вміст заліза в питній воді коливається від 0,1 мг/л до 0,3 мг/л. Однак, якщо систематично вживати воду, яка не підлягає даним критеріям, то це призведе до того, що у людських внутрішніх органах почнуть накопичуватися метали, що в свою чергу може викликати такі хвороби як:

- порушення обмінних процесів організму;
- дерматити,
- алергічні реакції;
- сухість шкіри;
- порушення злагодженої роботи внутрішніх органів;
- хвороби крові і т. д.

Крім того, високий вміст Феруму робить воду коричневою з неприємним металевим присмаком, що погіршує якість і смак приготовленої їжі. Все це доставляє значний дискомфорт, саме тому очищення води від сполук металів є дуже важливим економічним завданням.

## **1.2. Означення водопідготовки та основні методи первинного очищення прісних вод**

Нині очистка є досить актуальною процедурою, тому що антропогенний вплив людини на навколишнє середовище приносить велику шкоду гідросфері Землі. На даний час навіть прісні водойми вимагають особливих методів водоочистки [26].

Водопідготовка полягає в стабілізації (зазвичай лугом) та очищенні поверхневих і стічних вод на різних водоочисних установках для того, щоб в кінцевому результаті вони не містили різного виду механічних домішок, а також металів, масел тощо; це очистка природних джерел прісних вод, в

результаті якої якість води відповідає встановленим санітарно-гігієнічним нормам [9]. Водопідготовка здійснюється за допомогою водоочисних споруд або в спеціальних будівлях для того, щоб задовольнити потреби комунальних, промислових, теплових підприємств, транспорту і т. д. Вона передбачає очистку води від різних мікроорганізмів та шкідливих речовин і здійснюється за допомогою використання різних методів водоочистки, вибір якого, в кожному з випадків, залежить від рівня та характеру забруднення [38].

Нині очистка є досить актуальною процедурою, тому що антропогенний вплив людини на навколишнє середовище приносить велику шкоду гідросфері землі. На даний час навіть прісноводні водойми вимагають спеціальних методів очистки.

### **Методи водоочистки класифікуються за [31]:**

#### *1. Способом очищення:*

- ✓ Електричні способи очистки;
- ✓ Іонообмінні способи очистки;
- ✓ Фізико-хімічний метод очищення води;
- ✓ Механічна очистка;
- ✓ Зворотний осмос;
- ✓ Хімічне очищення води;
- ✓ Біологічне очищення води.

Якщо всі ці методи використовувати разом то такий спосіб очистки води називають комбінованим. Використання будь якого методу визначається від ступеня та характеру забруднення водойм.

#### *2. За областю застосування:*

- ✓ Акваріумні;
- ✓ Промислові;
- ✓ Побутові;



✓ Туристичні (застосовується як альтернативний метод відварювання води, тому що за областю застосування вони розраховані лише на малогабаритні водойми);

Сучасному світі запропоновано і впроваджено досить велику кількість методів та схеми знезараження водних джерел від шкідливих вірусів та бактерій, які можуть стати збудниками різних інфекційних захворювань. Їх можна поділити на такі групи [26]:

- Катіонообмінні методи;
- Хімічні або реагентні методи;
- Фізичні або безреагентні методи;
- Біохімічні методи.

Вибір того чи іншого методу є досить не простою задачею, тому що потрібно врахувати концентрацію металів та їх форму, а також фізико-хімічні показники водойми (рівень рН, температура сірководень, вуглекислий газ, лужність, кисень, аміак, окисність тощо). Точніше обирати спосіб очищення води від металів методом пробного знезалізнення практично біля самого джерела водопостачання [38].

Щоб обрати правильний спосіб очистки необхідно визначити якого виду метали містяться у воді. Наприклад, залізо (Ферум*Fe*) у воді може перебувати в таких формах [11]:

❖ **двовалентне залізо *Fe (II)* або  $Fe^{2+}$**

Оскільки воно розчинне у воді, то неозброєним оком непомітне. Після того як на певний період залишити воду на повітрі, то при контакті з киснем метал окислюється та приходить у форму тривалентного.

❖ **тривалентне залізо *Fe (III)* або  $Fe^{3+}$**

Даний вид металу нерозчинний у воді, тому випадає в осад. Він має вигляд частинок оранжевого кольору, які можна побачити без використання додаткових пристроїв. Оскільки ці частинки порівняно великі за розміром, то даний вид заліза відфільтровується найлегше [12].

❖ **колоїдне залізо**

Даний вид металу перебуває у формі частинок крихітного діаметру. Він не випадає в осад, проте робить воду каламутною.

❖ **органічне залізо**

Міститься у воді в симбіозі з органічними речовинами. Воно може надавати воді певного відтінку.

❖ **бактеріальне залізо**

Зустрічається досить рідко, утворюється бактеріями, які створюють для себе середовище життєдіяльності, використовуючи цю речовину. Виглядає як кольорове плівка на поверхні води або драглистий осад.

Безреагентне очищення води від металів — це один з найпоширеніших сучасних методів. Як правило, він використовується, коли рівень металів в рідині не перевищує 10 мг/л. Його суть полягає в окисненні  $Fe^{2+}$  під дією  $O_2$ . Використовуючи компресор, методом примусової реакції молекулярний склад води поповнюється киснем [9].

Перевага безреагентної очистки в тому, що не використовуються хімікати, а вартість такої системи досить низька. Однак слід зазначити, що цей тип системи є відносно великим за розмірами і також є первинним етапом очищення води, що вимагає подальшого осадження та фільтрації.

У випадках коли концентрація металу у воді є незначною, підходить безреагентний метод очищення води.

За способом роботи фільтрація поділяється на такі категорії [26]:

- ❖ Очищення каталітичним навантаженням (наповнювачем);
- ❖ Аерація;
- ❖ Зворотний осмос;
- ❖ Магнітні фільтри;
- ❖ Електромагнітна очистка;
- ❖ Поліфосфатний фільтр.

Як правило, реагентний метод призначений для фільтрації води, що містить велику кількість Феруму та інших домішок (переважно марганцю та сірководню). Цей метод заснований на здійсненні хімічних реакцій, а саме [9]:

- Додавання у воду різного виду окислювачів: гідрохлорид натрію –  $NaOCl$ , що широко використовується на промислових очисних спорудах, перманганат калію –  $KMnO_4$  («марганець»), озон для очищення води від заліза. Після осідання залозистого осаду його затримує механічний фільтр [3].

- Для коагуляції у воду потрібно додати спеціальні реагенти, такі як сульфат заліза чи сульфат алюмінію. Після хімічної реакції метали випадають в осад [22].

- Також для видалення металів з води використовується іонообмінний фільтр, який являє собою оболонку, заповнену гранульованою іонообмінною смолою та оснащену блоком управління. Принцип дії заснований на здатності катіонів смол вилучати з води двовалентні метали. Ці фільтри є універсальними, оскільки вони можуть одночасно пом'якшувати воду та видаляти двовалентне залізо, марганець та інші метали, розчинені у воді.

Реагентний метод частіше використовується для очищення великої кількості води та роботи станцій знезалізнення води.

### **1.3. Вибір методу очистки підземних вод**

#### **Механічне очищення води**

У процесі механічної очистки води з неї видаляються механічні домішки шляхом осадження та фільтрації [10]:

- суспензії;
- іржа;
- тверді частинки;
- пісок.

Це найпростіший і економічний спосіб очищення води.

### **Принцип механічного очищення**

Крупні домішки, у тому числі сполуки металів у воді, уловлюються ситами, колосниками, піщаними кар'єрами, септиками різної конструкції за розмірів. Забруднюючі речовини на поверхні вловлюються нафтоуловлювачами, газойлями, відстійниками тощо. Завантажений фільтруючий матеріал є основним робочим елементом установки механічної очистки. Для нормальної роботи системи очищення важливий правильний підбір матеріалів та їх характеристики [9].

### **Застосування механічної фільтрації води**

Механічна фільтрація широко використовується на міських очисних спорудах. Це найпоширеніший метод очищення при заборі води з відкритих джерел (водойми, річки, озера тощо). У побутових системах фільтрації, які використовуються в квартирах і офісах, механічні фільтри для води зазвичай встановлюються на вході системи і виконують попереднє очищення. Механічна очистка дозволяє видалити 65-75% нерозчинних домішок у побутових стічних водах і 95% у промисловості. Багато з них можуть бути використані у виробництві як цінні домішки [9].

Фільтри з механічними картриджами - переважно використовується для очищення води від нерозчинних сполук  $Fe^{3+}$ . Фільтрувальний елемент може затримувати в системі очищення води частинки розміром більше 15 мкм, а в системі тонкої фільтрації – до 5 мкм. Переважно такий спосіб видалення розчинних металів використовується в житлових приміщеннях з централізованим водопостачанням. Цей метод не підходить для очищення колодязної води. Фільтри механічної очистки можуть використовуватися лише за умови попередньої аерації [38].

## Технологія зворотного осмосу

На сьогоднішній день метод зворотного осмосу є дуже поширеною технологією очищення води. Це метод, при якому розчин проходить під тиском спеціальну синтетичну мембрану, в якій затримується до 98% мінеральних солей і домішок. Про метод зворотного осмосу вперше заговорили в 1950-х роках [26]. Сьогодні зворотний осмос вважається ефективним методом у сфері очищення води. Пермеат зворотного осмосу - це чиста вода, яка використовується для технічних і питних потреб.

Система зворотного осмосу може ефективно видаляти розчинні метали. Оскільки іони заліза мають набагато більші пори, ніж мембрани зворотного осмосу, то ефективно використовувати саме цей метод. У даному випадку метал не накопичується в мембрані, а зливається з концентратом в дренажну трубу, уникаючи, таким чином, проблеми закупорки пір. Система зворотного осмосу може очищати воду з концентрацією металів до 10-20 мг/л. Рекомендується уникати контакту з повітрям (проміжний контейнер для зберігання) перед подачею в установку зворотного осмосу, щоб запобігти окиснення заліза [11].

Крім того, метод зворотного осмосу можна використовувати для видалення невеликих концентрацій тривалентного (колоїдного) заліза. Ці системи також ефективні для очищення води від звичайного поширеного елемента – марганцю. Для вдалого завершення процесу необхідні також розчини, розчинники і напівпроникні мембрани, які розділяють їх і водночас діють як бар'єр для розчиненої речовини [12].

Прямий осмос – це процес масообміну повітряної напірної мембрани. Його можна описати так: осмотичний тиск розчинника змушує його молекули переміщатися в бік розчину і розбавляти його. Збільшення об'єму розчину супроводжується підвищенням гідростатичного тиску. Коли статичний тиск і осмотичний тиск досягають рівноваги, процес припиняється [38].

Якщо тиск розчину збільшиться, то процес буде зворотним. Так і відбувається зворотний осмос, у процесі якого одна сторона мембрани збільшує концентрацію розчину, а інша – збільшує об'єм розчинника.

### Зворотноосмотична мембрана

У фільтрах зворотного осмосу переважно застосовуються напівпроникні мембрани. Їхня будова виглядає наступним чином (рисунок 1.2) [11]:

- 1) бар'єром для домішок (селективний шар);
- 2) зміцнюючий шар мембрани (армуючий шар).

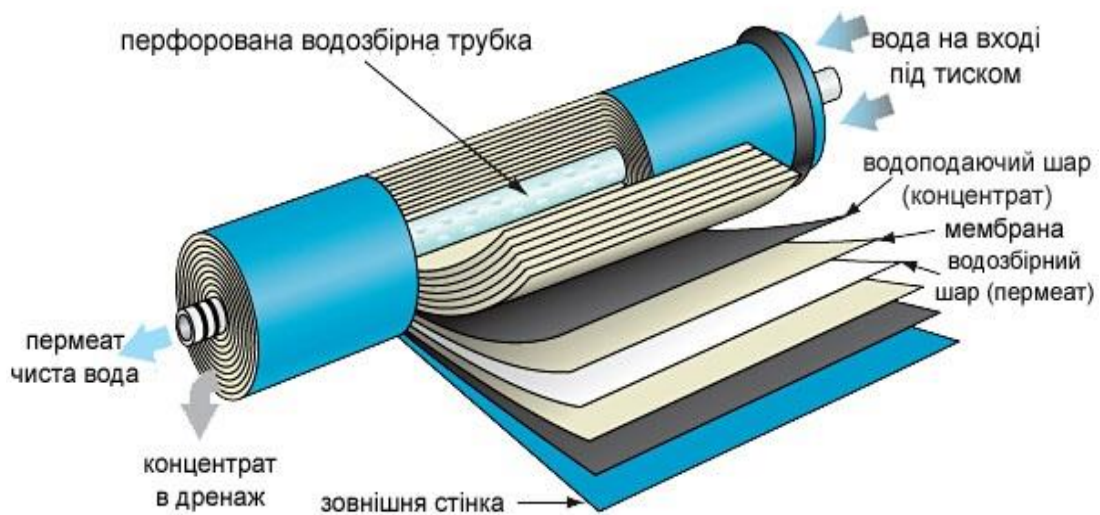


Рис. 1.2. Будова мембрани зворотного осмосу

У фільтруючому елементі зворотного осмосу мембрана згорнута в рулон. Така конструкція дозволяє отримати велику активну поверхню і розмістити її в компактному корпусі стандартного розміру. Мембрана зворотного осмосу є основним елементом системи очищення. Для виготовлення мембран використовуються такі матеріали як [19]:

1. Армований поліамід. Цей матеріал працює в широкому діапазоні значень рН і не є живильним середовищем для мікроорганізмів. Міцні поліамідні мембрани витримують високий робочий тиск і характеризуються хорошою селективністю до NaCl і органічних речовин. Основний недолік –

низький вміст антиоксидантів. Вода з високим вмістом хлору швидко призведе до втрати поліамідної мембрани [9].

2. Ацетат целюлози. У 1950-х роках з'явилися дешеві і прості у використанні мембрани з цього матеріалу. Вони чудово очищають воду від високомолекулярних солей, але «пропускають» багато низькомолекулярних сполук. Крім того, вони працюють в обмеженому діапазоні рН і легко біологічно розкладаються. В даний час ацетат целюлози замінили більш досконалими матеріалами [9].

3. Тонкоплівкові композиційні матеріали. Мембрана з цього матеріалу безумовно найдосконаліша. Композитна мембрана має високу селективність до всіх відомих домішок [9].

Технологія зворотного осмосу — це установка, яка може відмінно фільтрувати воду від розчинених мінеральних солей (рисунок 1.3). Очищення води зворотним осмосом забезпечує видалення з неї від 90% до 98% неорганічних сполук.

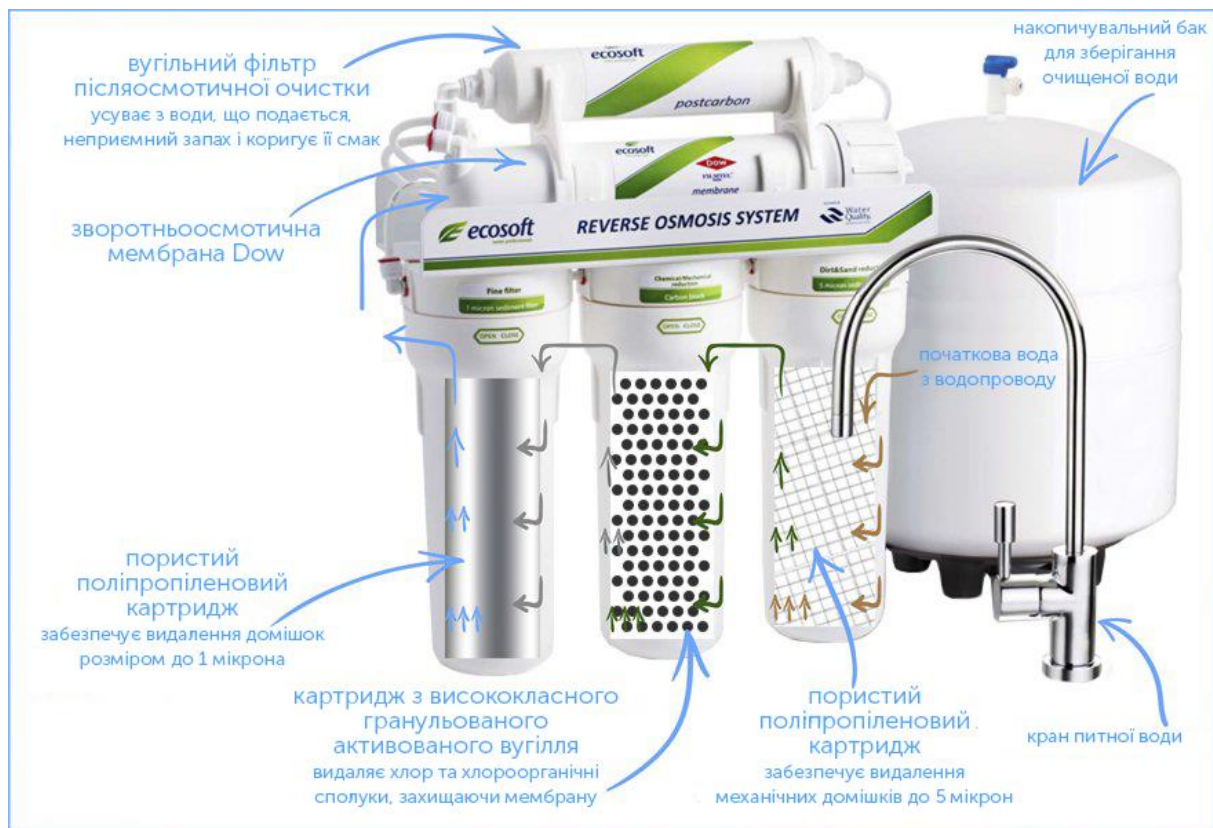


Рис. 1.3. Будова системи зворотного осмосу

Мембрана може фільтрувати органічні речовини, молекули яких перевищують молекулярні розміри мінеральних солей. Сполуки з молекулярною масою вище 150 *Da* видаляються з води на 100%. Можливість проникнення бактерій і вірусів через фільтр практично неможлива, виключенням є лише механічні пошкодження фільтруючого елемента мембрани [19]. Очищену воду, отриману на нормально діючій установці зворотного осмосу, не потрібно кип'ятити і додавати дезінфікуючі засоби.

Через мембрану зворотного осмосу можуть вільно проходити розчинені двоатомні гази: азот, водень і кисень.

Зворотний осмос води – це процес фільтрації води, яка використовується для питних та промислових потреб [11]. Технології зворотного осмосу використовуються в таких установах:

- ✓ індивідуальне водопостачання;
- ✓ різного виду енергетичні установки (ТЕЦ, ГЕЦ, АЕС тощо);
- ✓ житлово-комунальні послуги, призначені для водопостачання об'єктів I категорії;
- ✓ науково-дослідні лабораторії, у тому числі різних комплексів оборони.

Основним напрямком використання пристроїв зворотного осмосу є очищення води для зменшення загальної мінералізації та опріснення солоної води [26]. Фільтр зворотного осмосу є одним із етапів попередньої обробки для отримання надчистої води в електронній промисловості, теплоенергетиці та медицині.

### **Промисловий зворотний осмос**

Промислові та комерційні пристрої зворотного осмосу – це високопродуктивні установки очистки водних джерел з напівавтоматичним або повністю автоматичним керуванням (рисунок 1.4) [9]. Вони включають кілька модулів, що відповідають за попередню обробку та очищення мембрани





Рис. 1.4. Промислова технологія зворотного осмосу

Типовий промисловий пристрій зворотного осмосу для очистки води складається з таких елементів [26]:

1. Груба фільтрація. Нерозчинні частинки утримуються сіткою із заданим діаметром осередку.
2. Колонка для видалення заліза. У даному елементі залізо у двовалентному стані окислюється до тривалентного та утилізується у вигляді осаду, що не розчиняється.
3. Адсорбційний фільтр. Активний адсорбент поглинає молекули вільного хлору.
4. Зворотноосмотична мембрана. Утилізує розчинену сіль та інші види забруднень.

Однією з основних переваг промислових зворотноосмотичних систем є масштабованість. Щоб збільшити продуктивність, можна додати стільки фільтруючих елементів, скільки буде потрібно.

Процес зворотного осмосу вимагає високого робочого тиску, створюваного за допомогою спеціальних насосів [26]. Система оснащена датчиками, манометрами, автоматичними зливними клапанами, пристроями

для обв'язки труб. Для моніторингу якості води, що отримується в результаті очистки, налаштовується такий пристрій як TDS-метр.

Робота промислової установки зворотного осмосу складається з двох етапів [26]:

1. Очистки води.
2. Промивки мембрани.

Управління здійснюється мікроконтролером. Через той факт, що на виході очищена вода відрізняється за складом, повна настройка і регулювання системи проводяться окремо. Можуть знадобитися додаткові підготовчі кроки.

*Якщо якість вихідної води хороша, то деякі етапи попередньої фільтрації можна відкинути, що спрощує роботу установок та зменшує витрати.*

### **Побутова система зі зворотним осмосом**

Побутова система зворотного осмосу для очистки води – це компактний прилад, який може працювати при відносно низькому тиску (до 3 атмосфер). У більшості випадків вони не мають підсилювального насоса, а фільтрація відбувається за рахунок тиску водопроводу. Такі установки щодня виробляють кілька літрів чистої води [11]. Через низький робочий тиск побутові мембрани потрібно очищати частіше, ніж промислові. У побутових приміщеннях після зворотного осмосу встановлюють мінералізатор-пристрій для обробки чистої води, яку можна збагачувати корисними для людини мінералами в необхідній концентрації. Ця вода придатна тільки для пиття. Мінералізація взагалі не впливає на приготування їжі або гарячі напої (або має негативний вплив) [37].

### **Метод хімічної очистки підземних вод**

Хімічна очистка води від металів відбувається шляхом додавання у рідину різного виду хімічних реагентів, які реагують із забруднювачами, в результаті чого останні перетворюються у нерозчинний осад.

Метод хімічного очищення води дозволяє значно знизити концентрацію розчинних домішок у рідині до 25%, а нерозчинних, в свою чергу, до 95%.

### **Реагенти, що використовуються для методу хімічної очистки підземних вод**

Метод хімічної очистки передбачає використання наступних реагентів [33]:

- ✓ підсолоджуючі речовини – вапно, сода, гідроксид натрію;
- ✓ окислювачі – озон, хлор, перманганат калію;
- ✓ підкисляючі речовини – соляна і сірчана кислоти.

Методи хімічної очистки підземних та стічних вод в основному використовуються в поєднанні з іншими методами, такими як механічна і фізико-хімічна очистка води. Хімічна обробка зазвичай використовується як попередній етап перед наступною біологічною обробкою [3].

Хімічні методи очищення включають використання окислювачів і коагулянтів для застосування технології швидкого окислення та осадження заліза [32]:

#### **❖ хлорування**

Метод передбачає окислення води із використанням спеціального дозатора хлору. Потрібно слідкувати за чітким дозуванням хлорування, оскільки це токсична речовина і не повинна бути надмірною у використанні [38].

#### **❖ озонування $O_3$**

Цей метод включає в себе окислення двовалентного заліза озоном (рис. 1.5). Дана технологія дозволяє відмінно знезаразити та очистити воду від сполук металів, проте є найдорожчою серед усіх доступних [38].

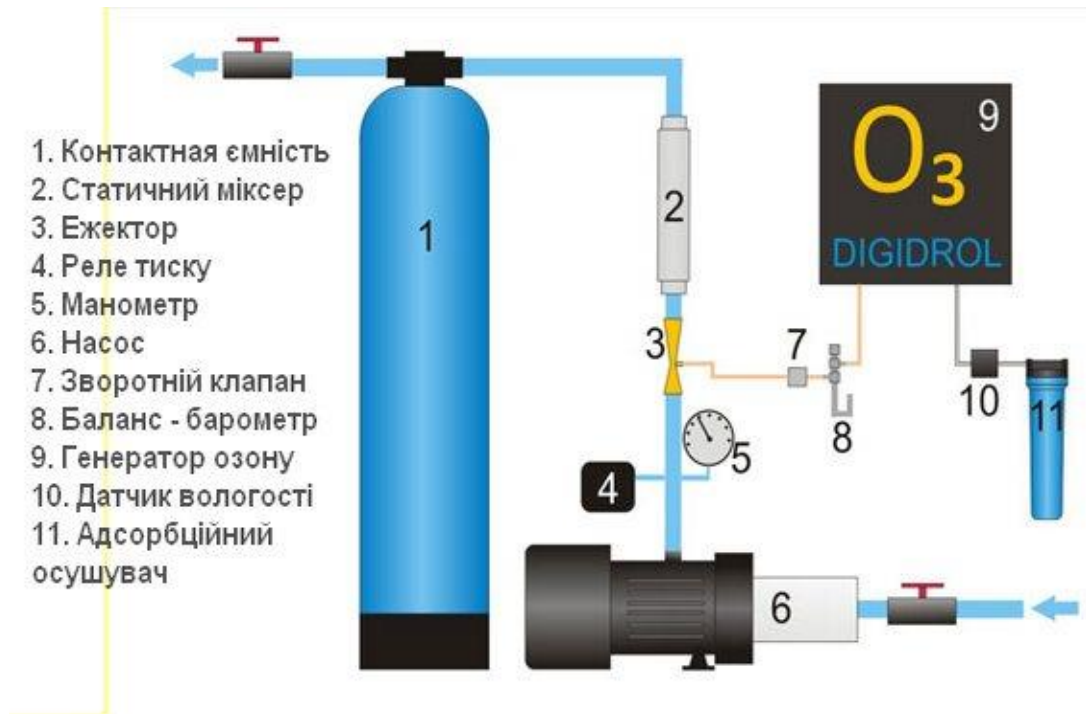


Рис. 1.5. Схема процесу озонування води

#### ❖ хлорид заліза $FeCl_3$

Хлорид заліза є чудовим коагулянтном, який перетворює вільне залізо в гідроксид заліза (III)  $Fe(OH)_3$ , під час процесу гідролізу, тим самим випадаючи в осад (розсипчасті коричневі пластівці). Ці пластівці є хорошими адсорбентами, під час їх утворення вода може видаляти не тільки залізо, а й різні природні забруднювачі [38].

#### **Метод іонообмінної очистки підземних та поверхневих вод**

Для очищення стічних вод від органічних і неорганічних сполук, зокрема заліза, широко використовуються методи іонообмінної очистки. Методи хімічної очистки, суть яких полягає у використанні вапна чи їдкого натру, а також осадження у вигляді гідроксидів, не у всіх випадках повністю очищають воду від сполук металів [27]. Крім того, останній метод вимагає великих витрат вапна, суворого дотримання певного значення рН стічних вод, а в результаті також спостерігається досить велика кількість гідратів оксидів металу, що випадає в осад.

Для того, щоб повністю очистити стічні та поверхневі води від металевих сполук, як правило, використовують досконаліші йонообмінні технології очистки (рисунок 1.6) [39].

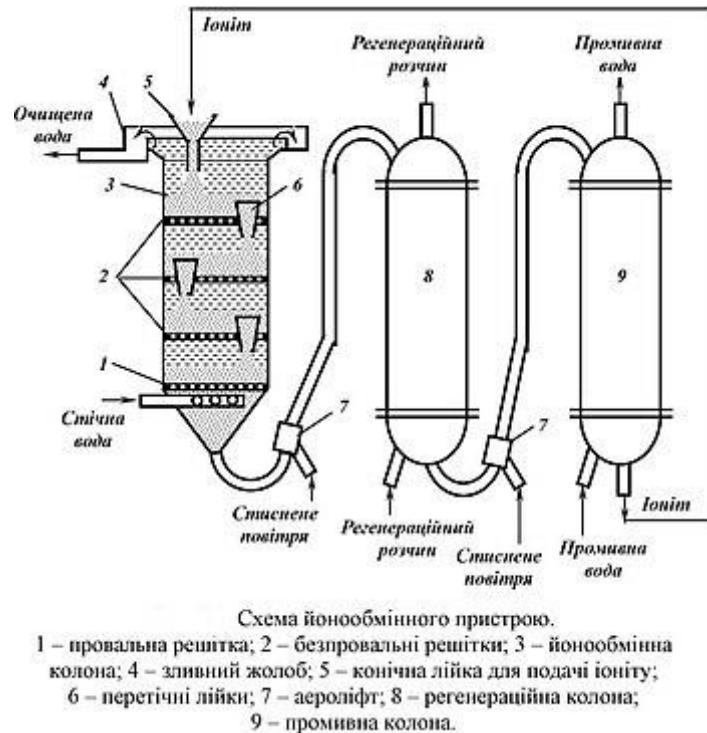
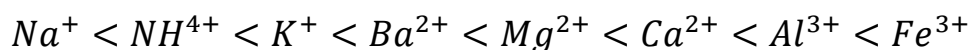
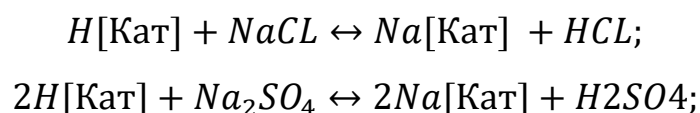


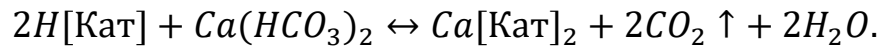
Рис. 1.6. Схема йонообмінного пристрою.

Механізм демінералізації води шляхом іонного обміну заснований на здатності йонообмінних смол частково видаляти іони металу з електроліту в обмін на аналогічну кількість іонів іоніту. Швидкість перебігу цього процесу залежить від таких чинників як валентність іонів, ступінь гідратації, їх заряд та радіус іонів. Реакція процесу іонного обміну у водному середовищі:



Оскільки вода спочатку проходить через катіонітові, а потім  $OH^-$ ,  $CO_3^{2-}$  чи  $HCO_3^-$  аніонітові фільтри, рухомі іони йонообмінника замінюються за рахунок аніонів і катіонів, розчинених у воді. Хімічна реакція йонного обміну між водою і речовиною виглядає наступним чином [32]:



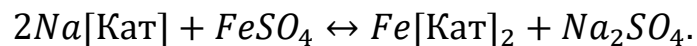


Робоча обмінна здатність катіонів значною мірою залежить від аніонного складу та загального вмісту солей у водному розчині, яка формулюється за допомогою відношення кількості іонів  $\text{HCO}_3^{3-}$  до суми концентрацій іонів  $\text{HCO}_3^{3-}$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{CL}^-$ ,  $\text{NO}_3^{3-}$ .

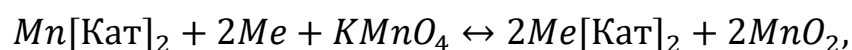
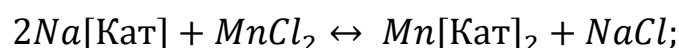
Потрапляючи в аніонообмінний фільтр, кислотні аніони у вихідному водному розчині будуть обмінюватися на рухомі йонообмінника:



Коли необхідно одночасно видалити метали та солі, які викликають жорсткість, а також коли у водному розчині, що підлягає обробці на шляху до катіонообмінного фільтра, не відбувається постачання кисню, використовують катіонізацію для видалення металевих сполук. Вода проходить через фільтр, заповнений *Na*-катіонітом. В результаті утворюється такий катіоніт як *NaCl* [32]:



За допомогою *K* і *Na* фільтрів досить ефективно відбувається видалення йонів  $\text{Mn}^{2+}$  з підземних та поверхневих вод в наслідку переведення їх у марганцеві сполуки (*IV*). Марганець (*II*) окислюється  $\text{KMnO}_4$  до стану оксиду *Mn* (*IV*), який осідає на зернах катіоніту у вигляді плівки. За допомогою обробки будь-якого катіоніта, що перебуває в натрієвій формі з величиною дисперсії 0,5-1,2 мм послідовним систематичним пропусканням 0,5% розчинів  $\text{MnCl}_2$  і  $\text{KMnO}_4$  отримують марганцевий катіоніт. Формула йонного обміну у водному розчині виглядає наступним чином [11]:



де  $\text{Me}^+$  – іон  $\text{K}^+$  або  $\text{Na}^+$ .

## **Технологія біологічної очистки**

У виробничих і побутових умовах активно використовуються методи біологічного очищення.

Використання мікроорганізмів для очистки води – це незмінний етап покращення рівня якості поверхневих та стічних вод, що застосовується разом із фізичними, механічними та хімічними технологіями.

Природний процес, відтворений у штучних умовах, допомагає боротися з багатьма забруднювачами без використання дорогих методів.

Розвиток біологічних методів очистки води почався наприкінці XIX ст. Засновником цього методу були британці в період коли промисловий розвиток країни досяг свого розквіту, а ґрунтовий метод, який використовувався в той час, був не в змозі очищати великі обсяги стічних та поверхневих вод [26].

На сьогоднішній день цей метод вважається найкращим для досягнення якісної обробки води, забрудненої внаслідок роботи промислових підприємств та життєдіяльності населених пунктів з різною густиною населення.

Біологічний метод очистки підземних та поверхневих вод заснований на фізіологічному та біохімічному процесах самоочищення природних водойм [12]. Дана технологія має досить багато переваг, таких як низькі затрати електроенергії, висока якість очистки, найприродоподібніша технологія і т. д.

### **Типологія пристроїв для біоочистки води:**

- **аеротенки**

Аеротенки – це спеціальні резервуари, в яких знаходиться біоактивний мул, що складається із мікроскопічних тварин та колоній бактерій, які дуже швидко збільшують свою популяцію. Такому інтенсивному росту сприяють надлишок кисню, що поступає у систему потоком повітря та органічні речовини, які перебувають в стічних водах. Внаслідок адгезії бактерій утворюються пластівці та виділяються ферменти, при цьому колонії мінералізують органічні забруднення підземних та поверхневих вод. Мул разом з такими пластівцями швидко випадає в осад, відокремлюючись від

рідини. Поглинаючи бактерії, амеби, джгутикові, інфузорії та ін., утворюють бактеріальну масу мулу [32].

- **біологічні ставки**

Технологія полягає в тому, що для очищення стічних вод залучаються всі живі організми, що знаходяться у середовищі біологічних ставків.

- **Біофільтри**

Основою для фільтрування в даного виду технології є шар крупнозернистого матеріалу, покритий тонкою бактеріальною плівкою. Вона, в свою чергу, собою являє колонії бактерій, які в процесах біологічного окислення забруднень активно беруть участь. Процес біофільтрації широко застосовується для очистки підземних та поверхневих вод, у акваріумних фільтрах та ін.

Перед застосуванням технології біологічної очистки попередньо проводиться механічне очищення стічних вод.

Біологічний метод являє собою використання таких мікроорганізмів як залізобактерії. Вони окислюють залізо, завдяки чому цей спосіб вважається безпечним [16]. Після процедури очистки слід звільнити воду від продуктів, що утворилися в результаті життєдіяльності залізобактерій процесом адсорбції [23].

Після біологічного очищення, як правило, проводиться дезінфекція, яка видаляє хвороботворні бактерій.

**Для дезінфекції після технологій біоочистки застосовують х2бї:**

- ✓ озонування;
- ✓ електроліз;
- ✓ ультразвук;
- ✓ хімічне очищення за допомогою хлорування рідким хлором або хлорним вапном;



### Застосування методу біологічного очищення води

Технологія біоочистки, як правило, ефективна при застосуванні її для очищення відходів комунально-побутових стоків, а також підприємств нафтопереробної, целюлозно-паперової промисловостей, фабрик з виробництва штучного волокна [11].

Під час використання біоочисних споруд варто враховувати наступні чинники:

- ❖ чинники, які певним чином впливають на протікання процесу;
- ❖ параметри і умови перебігу процесу;
- ❖ процес окислення забруднень;
- ❖ властивості біоценозу;
- ❖ гідробіологічний та гідрохімічний склад біомаси активного мулу, що забезпечує в аеротенках безпосереднє окислення речовин забрудників.

### Технологія біохімічного очищення

Суть цього методу полягає в тому, що на зернах контактного завантаження фільтрів насаджуються та вирощування бактерії різних видів (наприклад *Caulococcusmanganifer*, *Leptothrix*, *Gallionella*, *Leptothrix*, *Metallogeniumpersonatum*, *Bacteriamanganicus*) що споживають метали, такі як залізо чи марганець. Наступним кроком відбувається фільтрація неочищеної води. Такі бактерії в результаті своєї життєдіяльності «з'їдають» сполуки металів [16]. Відмираючи, на зернах контактного завантаження фільтру даного виду бактерії створюють пористу структуру матриксу, яка включає високий вміст оксиду марганцю, що слугує додатковим каталізатором при процесі окиснення двовалентних металів. Такі фільтри знезалізнують воду повністю лише за умови, якщо швидкість фільтрації сягає до 22 м/год.

## РОЗДІЛ II. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ОЧИЩЕННЯ ПІДЗЕМНИХ ТА СТІЧНИХ ВОД НА БІОЛОГІЧНОМУ РЕАКТОРІ

### 2.1. Математичне моделювання процесу очищення підземних та стічних вод від сполук металів на біореакторі

Будь-яка динамічна система, яка зазнає перетворень, описується математичними моделями. На початковому етапі створення математичної моделі необхідно надати фізичний опис процесу. Описана система поділяється на складові основних процесів, що відбуваються в ній. Після аналізу кожного процесу змодельований об'єкт описується математично. Перед складання математичного опису вибраного процесу завжди потрібно описати його складові параметри [21].

На опису досліджуваного процесу математично ґрунтується системний аналіз, завдяки якому можна спрогнозувати те як буде поводитися система, розглядаючи її з різних точок зору: кінетики масообміну, гідродинамічної структури, а також синтезу, а також накопичення нових клітин і механічного видалення забруднювачів [22]. Пізніше утворюється повністю сформульована математична модель із усіма потрібними параметрами.

Роботу біореактора можна умовно розділити на два основних етапи. На першому етапі під час завантаження біологічного реактора через нього протікає чиста вода, що містить сполуки заліза та залізобактерії. В результаті на опорній поверхні утворюється активна каталітична клітинна поверхня і матриксу. Цей процес відбувається внаслідок адгезії негативно заряджених залізобактерій і первинної каталітичної мембрани. Тривалість даного етапу залежить від характеристик води, таких як бікарбонатна лужність, рН, концентрація іонів заліза та кількості залізобактерій. У цьому процесі формується початкова матрична структура, яка при кожному поступанні води в реактор збільшується за рахунок припливу нових залізобактерій [18].

На другому кроці, описаному кінетичною моделлю, після очищення біореактора бактерії, які залишилися з попереднього циклу та бактерії, які надходять з водою і закріплені на поверхні завантаження, залишаються в контактному завантаженні. Тому після промивання в біореакторі залишається  $10^3 - 10^5$  кл / см<sup>3</sup> залізобактерій, що змушує його працювати відразу після промивання [20].

Бактерії заліза у воді під час своєї життєдіяльності утворюють клітинні ланцюги, вкриті пористим циліндричним покриттям, схожим на нанотрубки однакового діаметру *Leptothrix* або спіральну структуру-*Gallionella*. Із часом пориста структура біомінералів  $\gamma$ -FeOOH покривається деякими окремими бактеріями в навантаженому поровому просторі, і конвективний потік проходить через нього та поступово повністю заповнює пористий простір. Із збільшенням кількості матричних структур в інтерстиціальному просторі спостерігалось їх переміщення разом з потоком води до нижньої частини біореактора [36].

Через певний період часу, коли рівень води над контактним навантаженням паралельно збільшується, тиск потоку буде втрачено, тому розрахована середня швидкість за час не зміниться. І навпаки, локальна швидкість у проміжному завантажувальному просторі має тенденцію змінюватися з часом між промиваннями біореактора, але в цьому випадку, щоб спростити модель, передбачається, що інтегральна швидкість і середня швидкість рівні. Кінетична модель стосується лише стадій генерації, росту та розвитку біомінеральної матричної структури в поровому просторі біологічного реактора [18].

Змоделюємо процес біологічного очищення підземних вод від сполук металів. Щоб це зробити розглянемо модельну задачу, розроблену к.т.н. Присяжнюком І. М. та д.т.н. Квартенком О.М. [33].

$$V = -\theta(M)grad P, \quad (2.1.1)$$

$$\sigma(M) \frac{\partial B}{\partial t} = W(x, t) \cdot B - v(x) \frac{\partial B}{\partial x} - \gamma(x, t) \cdot H(x, t) - \chi \cdot B, \quad (2.1.2)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} = W(x, t) \cdot U + \gamma(x, t) \cdot H(x, t) - \chi \cdot U, \quad (2.1.3)$$

$$\sigma(M) \frac{\partial F}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial F}{\partial x} - \beta_1 W(x, t) \cdot B - \beta_2 W(x, t) \cdot U - R_{chem} - R_{other}, \quad (2.1.4)$$

$$\sigma(M) \frac{\partial S}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial S}{\partial x} - k_1 S + H^*(x, t) + \eta_1 W(x, t) \cdot B, \quad (2.1.5)$$

$$\frac{\partial M}{\partial t} = k_1 \cdot S - H^*(x, t) + \eta_2 W(x, t) \cdot U. \quad (2.1.6)$$

Відповідні граничні та початкові умови для рівнянь (2.2–2.6) зображуються наступним чином:

$$B(x, t)|_{t=0} = B_0^0(x); F(x, t)|_{t=0} = F_0^0(x); S(x, t)|_{t=0} = S_0^0(x);$$

$$B(x, t)|_{t=0} = B_*(t); F(x, t)|_{t=0} = F_*(t); S(x, t)|_{t=0} = S_*(t);$$

$$U(x, t)|_{t=0} = U_0^0(x); M(x, t)|_{t=0} = M_0^0(x).$$

Рівняння (2.1.1) являє собою рівняння фільтрації, рівняння (2.1.2-2.1.4) описують процес біохімічно-абіотичного окиснення Феруму внаслідок адгезії залізобактерій, що кріпляться на стаціонарній каталітичній оболонці зерен і матриксу міжпорового простору контактного завантаження біореактора та бактерій, які поступають разом із неочищеною водою [18]. Рівняння (2.1.5, 2.1.6) є рівнянням процесу накопичення-передачі матриксу, що утворюється під час роботи на висоті контактного навантаження реактора. Запропонована модель враховує вплив кількості залізобактерій у воді на кінетику їх розвитку в середовищі контактного завантаження біореактора. Внаслідок аналізу цього процесу враховується також зворотний вплив характеристик процесу, а точніше кількість структур матриксу, що у контактному завантаженні біореактора випала в осад, а також характеристики реактора середовища через коефіцієнти масообміну, пористості і т. д. Вважається, що завдяки гідродинаміці потоку та саморегуляції біохімічних процесів швидкість залишається середньою [18].

Перша частинка рівняння (2.1.2)  $W(x, t)$  – це швидкість росту мікроорганізмів, описана рівнянням Моно [33]:

$$W(x, t) = \frac{\mu_{max} F(x, t)}{(F(x, t) + K_F)} \quad (2.1.7)$$

де  $K_F$  – константа насичення, г/м<sup>3</sup>,  $F(x, t)$  – кількість двовалентного заліза у воді, що підлягає очищенню, г/м<sup>3</sup>;  $\mu_{max}$  – максимальна питома швидкість росту та розвитку мікроорганізмів, год<sup>-1</sup> [18].

$H(x, t)$  – це функція, що встановлює зв'язок на одиницю об'єму неочищеної води між масовою часткою залізобактерій  $B(x, t)$  та середньостатистичною концентрацією бактерій  $U(x, t)$  у міжпоровому просторі матриксу біо-мінералів, а також на площині контактного завантаження реактора [33]:

$$H(x, t) = \begin{cases} B(x, t), & \text{якщо } B(x, t) < B^{**} - U(x, t), \\ B^{**} - U(x, t), & \text{якщо } B(x, t) \geq B^{**} - U(x, t), \end{cases}$$

$H^*(x, t)$  – це функція, що показує перехід матриксу, враховуючи його граничне насичення, із статичного стану в динамічний:

$$H^*(x, t) = \begin{cases} k_2 \cdot M(x, t), & \text{якщо } M(x, t) < M_*^*, \\ k_3 \cdot (M(x, t) - M_*^*), & \text{якщо } M(x, t) \geq M_*^*, \end{cases}$$

де,  $M_*^*$  – максимальна концентрація матриксу в біологічному реакторі, г/м<sup>3</sup>;  $B$  – середня концентрація біомаси феробактерій на одиницю об'єму вихідної води, в момент часу, що розглядається, яка проходить через біореактор, г/м<sup>3</sup>;  $M$  – загальна концентрація структур матриксу в реакторі на даний момент часу, г/м<sup>3</sup>;  $U$  – середнє значення біомаси залізобактерій, що знаходяться на матриксних структурах та поверхні первинної статичної оболонки завантаження в міжпоровому просторі реактора, г/м<sup>3</sup>;  $B^{**}$  – гранично допустима величина біомаси бактерій матриксу біологічного реактора, г/м<sup>3</sup> [33].

Коли в контактному завантаженні біореактора через міжпоровий простір проходить потік води, то реактор, в свою чергу, з плином часу наповнюється матриксними структурами, в результаті чого відбувається їх частковий відрив.

Він описується функцією  $k_2 \cdot M(x, t)$  за головної умови, що  $M(x, t) < M_*^*$ . Коли виконується умова  $M(x, t) \geq M_*^*$  (накопичення матрикських структур у міжпоровому просторі біореактору перевищує його максимальну брудомісткість), то відбувається відрив матрикських структур, а також їх подальший перехід у потік води:  $k_3(M(x, t) - M_*^*)$ , де  $k_3$  – коефіцієнт відриву надлишку структур матриксу,  $\text{год}^{-1}$  [18].

Запропонована задача (2.1.2 – 2.1.6) зводиться до розв'язування  $n$  задач на відповідних проміжках часу  $n\Delta t \leq t \leq (n + 1)\Delta t$  аналогічно [5]:

$$\sigma(M_n) \frac{\partial B_n}{\partial t} = W_n(x, t)B_n - v(x) \frac{\partial B_n}{\partial x} - \gamma(x, t)H_n(x, t) - \chi B_n, \quad (2.1.8)$$

$$\frac{\partial U_n}{\partial t} = W_n(x, t)U_n + \gamma(x, t)H_n(x, t) - \chi U_n, \quad (2.1.9)$$

$$\sigma(M_n) \frac{\partial F_n}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial F_n}{\partial x} - \beta_1 W_n(x, t)B_n - \beta_2 W_n(x, t)U_n, \quad (2.1.10)$$

$$\sigma(M_n) \frac{\partial S_n}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial S_n}{\partial x} - k_1 S_n + H_n^*(x, t) + \eta_1 W_n(x, t)B_n, \quad (2.1.11)$$

$$\frac{\partial M_n}{\partial t} = k_1 S_n - H_n^*(x, t) + \eta_2 W_n(x, t)U_n, \quad (2.1.12)$$

$$W_n(x, t) = \frac{\mu_{\max} F_n(x, t)}{(F_n(x, t) + K_F)}. \quad (2.1.13)$$

Граничні умови процесу:

$$B_n|_{x=0} = B_*(t); \quad F_n|_{x=0} = F_*(t); \quad S_n|_{x=0} = S_*(t);$$

Початкові умови на відповідних проміжках часу  $n\Delta t \leq t \leq (n + 1)\Delta t$ :

$$B_n|_{t=n\Delta t} = B^{**}(x) = \begin{cases} B_0^0(x), \text{ якщо } n = 0, \\ B_{n-1}(x, n\Delta t), \text{ якщо } n > 0, \end{cases}$$

$$U_n^*(x, (n - 1)\Delta t) = \begin{cases} U_0^0(x), \text{ якщо } n = 0, \\ U_{n-1}(x, (n - 1)\Delta t), \text{ якщо } n > 0, \end{cases}$$

$$F_n|_{t=n\Delta t} = F_n^*(x) = \begin{cases} F_0^0(x), \text{ якщо } n = 0, \\ F_{n-1}(x, n\Delta t), \text{ якщо } n > 0, \end{cases}$$

$$M_n^*(x, (n - 1)\Delta t) = \begin{cases} M_0^0(x), \text{ якщо } n = 0, \\ M_{n-1}(x, (n - 1)\Delta t), \text{ якщо } n > 0, \end{cases}$$

$$S_n|_{t=n\Delta t} = S_n^*(x) = \begin{cases} S_0^0(x), \text{ якщо } n = 0, \\ S_{n-1}(x, n\Delta t), \text{ якщо } n > 0, \end{cases}$$

$H_n^*$  – це функція за допомогою якої описується процес адгезії матриксних структур в міжпоровому просторі контактного завантаження реактора, із врахуванням його граничного насичення [18]:

$$H_n^*(x, t) = \begin{cases} k_2 M_n(x, t), M_n < M_n^*, \\ k_3 (M_n(x, t) - M_n^*), M_n \geq M_n^*. \end{cases}$$

Функція  $H_n$  – характеризує процес адгезії бактерій із врахуванням граничного насичення залізобактерій на кожному із проміжків часу відповідно  $n\Delta t \leq t \leq (n+1)\Delta t$  [18]:

$$H_n(x, t) = \begin{cases} B_n(x, t), \text{ якщо } B_n(x, t) < B^{**} - U_n(x, t), \\ B^{**} - U_n(x, t), \text{ якщо } B_n(x, t) \geq B^{**} - U_n(x, t). \end{cases}$$

Беручи до уваги зворотний вплив концентрації матриксних структур в міжпоровому просторі нижньої частини завантаження реактора на пористість середовища, концентрацію сполук двовалентного заліза  $Fe^{2+}$ , матриксних структур та залізобактерій на масообміні коефіцієнти в результаті отримаємо наступні дещо спрощені вирази [33]:

$$\begin{aligned} \sigma(M_{n-1}(x, t - \Delta t)) \frac{\partial B_n}{\partial t} &= W_{n-1}(x, t) \cdot B_{n-1}(x, t - \Delta t) - \\ &- v(x) \frac{\partial B_n}{\partial x} - \gamma(x, t) H_{n-1}(x, t) - \chi B_{n-1}(x, t - \Delta t), \end{aligned} \quad (2.1.14)$$

$$\frac{\partial U_n}{\partial t} = W_{n-1}(x, t) \cdot U_{n-1}(x, t - \Delta t) + \gamma(x, t) \cdot H_{n-1}(x, t) - \chi \cdot U_{n-1}(x, t - \Delta t), \quad (2.1.15)$$

$$\begin{aligned} \sigma(M_{n-1}(x, t - \Delta t)) \frac{\partial F_n}{\partial t} &= -v(x) \frac{\partial F_n}{\partial x} - \beta_1 W_{n-1}(x, t) \cdot B_{n-1}(x, t - \Delta t) - \\ &- \beta_2 W_{n-1}(x, t) \cdot U_{n-1}(x, t - \Delta t) \end{aligned} \quad (2.1.16)$$

$$\begin{aligned} \sigma(M_{n-1}(x, t - \Delta t)) \frac{\partial S_n}{\partial t} &= -v(x) \frac{\partial S_n}{\partial x} - k_1 S_{n-1}(x, t - \Delta t) + H_{n-1}^*(x, t) + \\ &+ \eta_1 W_{n-1}(x, t) \cdot B_{n-1}(x, t - \Delta t), \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

$$\frac{\partial M_n}{\partial t} = k_1 S_{n-1}(x, t - \Delta t) - H_{n-1}^*(x, t) + \eta_2 W_{n-1}(x, t) \cdot U_{n-1}(x, t - \Delta t), \quad (2.1.18)$$

$$W_{n-1}(x, t) = \frac{\mu_{\max} F_{n-1}(x, t)}{(F_{n-1}(x, t - \Delta t) + K_F)}, \quad (2.1.19)$$

$$H_{n-1}(x, t) = \begin{cases} B_{n-1}(x, t - \Delta t), & \text{якщо } B_{n-1}(x, t - \Delta t) < B^{**} - U_{n-1}(x, t - \Delta t), \\ B^{**} - U_{n-1}(x, t - \Delta t), & \text{якщо } B_{n-1}(x, t - \Delta t) \geq B^{**} - U_{n-1}(x, t - \Delta t). \end{cases}$$

$$H_{n-1}^*(x, t) = \begin{cases} k_2 \cdot M_{n-1}(x, t - \Delta t), & \text{якщо } M_{n-1}(x, t - \Delta t) < M_*^*, \\ k_3 \cdot (M_{n-1}(x, t - \Delta t) - M_*^*), & \text{якщо } M_{n-1}(x, t - \Delta t) \geq M_*^*. \end{cases}$$

Граничні та початкові та умови не змінюються. Зазначимо, що для кожної із задач складові масообміну відповідно на проміжках часу  $n\Delta t \leq t \leq (n+1)\Delta t$ , в даному випадку, функції відомі та коефіцієнт пористості – це величина стала на кожному наступному етапі та секції біологічного реактора [17].

Рівняння (2.1.14, 2.1.16, 2.1.17) – це лінійні неоднорідні диференціальні рівняння з частинними похідними першого порядку. Такі рівняння розв'язуються методом характеристик, так само як [5, 33].

$$B_n(x, t) = \begin{cases} \int_0^x \frac{g_n(\tilde{x}, \sigma_n f(\tilde{x}) - \sigma_n f(x) + t)}{v(\tilde{x})} d\tilde{x} + B_*(t - \sigma_n f(x)), & t \geq \sigma_n f(x), \\ \frac{1}{\sigma_n} \int_{n\Delta t}^t g_n(f^{-1}(\frac{\sigma_n f(x) - t + \tilde{t}}{\sigma_n}), \tilde{t}) d\tilde{t} + B_*(f^{-1}(\frac{\sigma_n f(x) - t}{\sigma_n})), & t < \sigma_n f(x), \end{cases} \quad (2.1.20)$$

$$F_n(x, t) = \begin{cases} \int_0^x \frac{F g_n(\tilde{x}, \sigma_n f(\tilde{x}) - \sigma_n f(x) + t)}{v(\tilde{x})} d\tilde{x} + F_*(t - \sigma_n f(x)), & t \geq \sigma_n f(x), \\ \frac{1}{\sigma_n} \int_{n\Delta t}^t F g_n(f^{-1}(\frac{\sigma_n f(x) - t + \tilde{t}}{\sigma_n}), \tilde{t}) d\tilde{t} + F_*(f^{-1}(\frac{\sigma_n f(x) - t}{\sigma_n})), & t < \sigma_n f(x), \end{cases} \quad (2.1.13)$$

$$S_n(x, t) =$$



$$= \begin{cases} \int_0^x \frac{Sg_n(\tilde{x}, \sigma_n f(\tilde{x}) - \sigma_n f(x) + t)}{v(\tilde{x})} d\tilde{x} + S_*(t - \sigma_n f(x)), t \geq \sigma_n f(x), \\ \frac{1}{\sigma_n} \int_{n\Delta t}^t Sg_n(f^{-1}(\frac{\sigma_n f(x) - t + \tilde{t}}{\sigma_n}), \tilde{t}) d\tilde{t} + S_*(f^{-1}(\frac{\sigma_n f(x) - t}{\sigma_n})), t < \sigma_n f(x), \end{cases} \quad (2.1.22)$$

де

$$\begin{aligned} Fg_n(x, t) &= -\beta_n W_{n-1}(x - f^{-1}(\Delta t), t) \cdot B_{n-1}(x - f^{-1}(\Delta t), t - \Delta t) - \\ &\quad - \beta_2 W_{n-1}(x - f^{-1}(\Delta t), t) \cdot U_{n-1}(x - f^{-1}(\Delta t), t - \Delta t) \\ Sg_n(x, t) &= \eta_1 W_{n-1}(x - f^{-1}(\tau), t) \cdot B_{n-1}(x - f^{-1}(\tau), t - \Delta t) + \\ &\quad + H_{n-1}^*(x - f^{-1}(\tau), t) - k_1 S_{n-1}(x - f^{-1}(\tau), t - \Delta t) \end{aligned}$$

Рівняння (2.1.15, 2.1.18) – це звичайні диференціальні рівняння з відокремленими змінними. Взявши до уваги відповідні початкові умови, маємо такі вирази [36]:

$$\begin{aligned} U_n(x, t) &= \int_{(n-1)\Delta t}^t (W_{n-1}(x - f^{-1}(\Delta t), s - \Delta t) \cdot U_{n-1}(x - f^{-1}(\Delta t), s - \Delta t) - \\ &\quad - \chi U_{n-1}(x - f^{-1}(\Delta t), s - \Delta t) + \gamma(x, t) H_{n-1}(x, s)) ds + U_*^*(x, (n-1)\Delta t), \end{aligned} \quad (2.1.23)$$

$$\begin{aligned} M_n(x, t) &= \int_{(n-1)\Delta t}^t (\eta_2 W_n(x - f^{-1}(\Delta t), s - \Delta t) \cdot U_n(x - f^{-1}(\Delta t), s - \Delta t) + \\ &\quad + k_1 S_n(x - f^{-1}(\Delta t), s - \Delta t) - H_{n-1}^*(x - f^{-1}(\Delta t), s)) ds + M_*^*(x, (n-1)\Delta t), \end{aligned} \quad (2.1.24)$$

де  $\Delta t$  – це час, на протязі якого головні характеристики середовища залишаються майже не змінними. Його значення залежне від попередньо заданої точності [18].

Початкове значення  $\Delta t$  встановлюється інтуїтивно і повністю визначається протягом процесу розв'язання задачі за допомогою числових методів та забезпечує його збіжність аналогічно до алгоритму [5, 33], [18].

## 2.2. Математичне моделювання процесу біологічної очистки підземних вод від сполук металів на біологічному реакторі з урахуванням впливу неорганічного вуглецю

Відповідно до досліджень Присяжнюка І.М. та Квартенка О.М. було представлено математичну модель, яка містить шість диференціальних рівнянь [17].

Рівняння (2.2.1-2.2.5) це рівняння, що зображують окислення колоніями залізобактерій *Gallionella* двовалентного заліза. Ці бактерії знаходяться на структурах матриксу та перебувають у контакті із непорушною каталітичною оболонкою і завантаженими частинками біореактора, а також феробактеріями, що надходять із свердловини. Рівняння (2.2.6, 2.2.7) описують процес накопичення-перенесення матриксних структур, що утворилися, в залежності від концентрації залізобактерій у вихідній воді та біологічному реакторі [17].

Ця модель враховує те, як бактерії, що поступають у реактор з водою, впливають на кінетику розвитку колоній феробактерій у контактному навантаженні біологічного реактора. Рівняння (2.2.1) дає змогу описати процес окиснення двовалентного заліза з урахуванням нестабільної мікрофлори води із свердловини, в залежності від кількості іонів гідрокарбонату заліза, концентрації неорганічного вуглецю та середньої швидкості потоку води у біореакторі [16].

Власне кажучи, через потік води вздовж постійної оболонки та контактного завантаження біологічного реактора на матриксних структурах, і відбувається процес поглинання бактеріями металів:

$$\sigma \cdot B_t = W(x, t) \cdot B - v(x) \frac{\partial B}{\partial x} - \gamma(x, t) \cdot H(x, t) - \chi B \quad (2.2.1)$$

$$H(x, t) = \begin{cases} B(x, t), & \text{якщо } B(x, t) < B^{**} - U(x, t), \\ B^{**} - U(x, t), & \text{якщо } B(x, t) \geq B^{**} - U(x, t), \end{cases} \quad (2.2.2)$$

де  $B$  – популяція залізобактерій бактерій у проточній через реактор воді кл/мл;  $v$  – швидкість проточної води у біологічному реакторі, м/год;  $B^{**}$  – концентрація насичення феробактерій,  $H(x, t)$  показує залежність між

функціями  $B(x, t)$  та  $U(x, t)$  (зв'язок між кількостями бактерій на структурах матриксу, видаленими із води та статичних залізобактерій);  $\gamma(x, t)$  – функція, яка характеризує швидкість поглинання бактеріями металу на зовнішній поверхні матриксних структур та оболонці завантаження біореактора;  $\chi$  – величина бактерій, що загинули, кл/мл [16].

$$W(x, t) = \frac{\mu_{max} U \cdot C}{(F + K_F) \cdot (C + K_C)} \cdot d(ph)$$

де  $B$  – концентрація неорганічного вуглецю, мг/дм<sup>3</sup>;  $U$  – кількість двовалентних металів  $Fe^{2+}$ , мг/дм<sup>3</sup>;  $K_F, K_C$  – константи швидкості реакції; функція  $d(ph)$  – показує залежність між бактеріологічним та абіотичним окисленням двовалентних металів  $Fe^{2+}$ ;  $\mu_{max}$  – швидкість біохімічної реакції, год<sup>-1</sup> [17].

Рівняння (2.2.3) показує як відбувається збільшення популяції бактерій, що закріплені на структурах матриксу, із врахуванням впливу швидкості видалення залізобактерій із води. Відповідно, коефіцієнт швидкості адсорбції залежний від іонної сили даного розчину [18]:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = W(x, t)U + \gamma(x, t) \cdot H(x, t) - \chi U, \quad (2.2.3)$$

де  $Q$  – концентрація іммобілізованих бактерій, що знаходяться на поверхні первинної стаціонарної оболонки контактного завантаження біореактора та структурах матриксу у міжпоровому просторі, кл/мл [18].

Рівняння (2.2.2, 2.2.3) описують те як відбувається відмирання феробактерій, але відповідно до описаних вище процесів до уваги в обчисленнях не беруться. Рівняння (2.2.4) зображує конвективний перенос допоміжного джерела вуглецю по висоті завантаження біореактора, із наступним синтезом феробактеріями [17].

$$\sigma \cdot C_t = -v(x) \cdot C_x - \alpha_1 W(x, t) \cdot B - \alpha_2 W(x, t)U \quad (2.2.4)$$

де  $C_x$  – концентрація допоміжного джерела неорганічного вуглецю, що ззовні надходить у систему, мг/дм<sup>3</sup>;  $v(x)$  – швидкість конвективного переносу

неорганічного вуглецю по глибині завантаження біореактора водним потоком, м/год;  $V, U$  – відповідно величини, що показують кількість у воді залізобактерій, що під час руху через контактне завантаження біологічного реактора залишаються на його поверхні, кл/мл;  $\alpha_1, \alpha_2$  – коефіцієнти масової частки джерела неорганічного вуглецю, який необхідний для побудови 1 г клітинної біомаси [18].

Задля переміщення по глибині завантаження біореактора іонів двовалентного металу, одночасного із його окисненням статичними та нестатичними колоніями залізобактерій, використовується дане рівняння:

$$\sigma(M) \frac{\partial F}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial F}{\partial x} - \beta_1 W(x, t) \cdot V - \beta_2 W(x, t) \cdot U - R_{chem} - R_{other} \quad (2.2.5)$$

де  $F$  – кількість іонів двовалентного металу у воді із свердловини, мг/дм<sup>3</sup>;  $R_{chem}$  – зображує абіотичне окиснення;  $v(x)$  – швидкість конвективного переміщення заліза по глибині завантаження біореактора протічною водою, м/год;  $\beta_1, \beta_2$  – коефіцієнти масової частки іонів  $Fe^{2+}$ , потрібних для побудови 1 г клітинної біомаси [17].

Рівняння (2.2.6) показує конвективне переміщення нестатичних матриксів із їх наступним кріпленням у нижніх шарах завантаження біологічного реактора до вже існуючих структур матриксу [18].

$$\sigma(M) \frac{\partial S}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial S}{\partial x} - m_1 S + m_2 M + k_1 W(x, t) \cdot V, \quad (2.2.6)$$

де  $v(x) \frac{\partial S}{\partial x}$  – показує частоту по глибині контактного завантаження біологічного реактора конвективного переносу, що утворюється в результаті потоку матриксних структур;  $(-m_1 S)$  – зображує адгезію структур матриксів, яка утворюється водним потоком на вже постійному матриксі, вже існуючому, в міжпоровому просторі завантаження біореактора;  $k_1 W(x, t) V$  – описує утворення біомінералів феробактеріями в міжпоровому просторі реактора;  $m_2 M$  – складова, що описує в рухомому потоці кінетику переходу статичних структур матриксу;  $k_1$  – масова частка тривалентного металу, схожа на біомінерали ( $\gamma FeOOH$ ), утворена в результаті побудови 1 г біомаси [33].

У рівнянні (2.2.7) зображено утворення матрикських структур бактеріями, закріпленими на поверхні завантаження реактора, із урахуванням збільшення їхньої популяції через деякий час, переміщення відірваних структур матриксу проточною водою та їх подальшим захопленням і переходом у стаціонарний стан із поступовим заповненням міжпорового простору [36].

$$M_t = m_1 S - m_2 M + k_2 W(x, t) U \quad (2.2.7)$$

де  $k_2 W(x, t) U$  – зображує утворення бактеріями, закріпленими на поверхні статичних матрикських структур у міжпоровому просторі біореактора, нових структур біомінералів;  $(-m_2 M)$  – показує як відбувається відрив частинки статичного матриксу із його майбутнім перенесенням у водний потік [17].

Внаслідок плавного накопичення структур матриксу в міжпоровому просторі завантаження біореактора при його роботі відбувається кольматація, втрата напору та підвищення водного рівня. Коли брудомісткість біореактора сягає максимальної позначки, то його необхідно переводити у режим промивки [36].

Така математична модель зображує процес очистки підземних вод від сполук металів з урахуванням популяції бактерій, що проходять через біологічний реактор із водним потоком та залізобактерій, які знаходяться на поверхні зерен завантаження реактора, утворених матрикських структур та впливу концентрації неорганічного вуглецю [17].

### **2.3. Математичне моделювання процесу біологічної очистки підземних вод від сполук металів на біологічному реакторі з урахуванням впливу допоміжного джерела кисню**

Змоделюємо процес біологічної очистки підземних вод від сполук металів на біологічному реакторі з урахуванням впливу додаткового джерела кисню. З цією метою розглянемо модельну задачу, розроблену к.т.н. Присяжнюком І. М. та д.т.н. Квартенком О. М. [18].

$$V = -\theta(M)grad P, \quad (2.3.1)$$

$$\sigma(M) \frac{\partial B}{\partial t} = W(x, t) \cdot B - v(x) \frac{\partial B}{\partial x} - \gamma(x, t) \cdot H(x, t) - \chi B, \quad (2.3.2)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} = W(x, t) \cdot U + \gamma(x, t) \cdot H(x, t) - \chi U,$$

$$\sigma \frac{\partial C}{\partial t} = -v(x) \cdot \frac{\partial C}{\partial x} - \alpha_1 W(x, t) B - \alpha_2 W(x, t) U,$$

$$\sigma \frac{\partial Q}{\partial t} = -v(x) \cdot \frac{\partial Q}{\partial x} - \zeta_1 W(x, t) B - \zeta_2 W(x, t) U, \quad (2.3.3)$$

$$\sigma(M) \frac{\partial F}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial F}{\partial x} - \beta_1 W(x, t) B - \beta_2 W(x, t) U - R_{chem} - R_{other}, \quad (2.3.4)$$

$$\sigma(M) \frac{\partial S}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial S}{\partial x} - k_1 S + H^*(x, t) + \eta_1 W(x, t) B, \quad (2.3.5)$$

$$\frac{\partial M}{\partial t} = k_1 S - H^*(x, t) + \eta_2 W(x, t) U. \quad (2.3.6)$$

Граничні та початкові умови:

$$B(x, t)|_{t=0} = B_0^0(x); F(x, t)|_{t=0} = F_0^0(x); S(x, t)|_{t=0} = S_0^0(x); C(x, t)|_{t=0} = C_0^0(x);$$

$$B(x, t)|_{x=0} = B_*(t); F(x, t)|_{x=0} = F_*(t); S(x, t)|_{x=0} = S_*(t); C(x, t)|_{x=0} = C_*(t);$$

$$Q(x, t)|_{t=0} = Q_0^0(x); Q(x, t)|_{x=0} = Q_*(t); U(x, t)|_{t=0} = U_0^0(x), M(x, t)|_{t=0} = M_0^0(x).$$

Внаслідок аналізу цього процесу враховується також зворотний вплив характеристик процесу, а точніше кількість структур матриксу, що у контактному завантаженні біореактора випала в осад, а також характеристики реактора середовища через коефіцієнти масообміну, пористості і т. д. Вважається, що завдяки гідродинаміці потоку та саморегуляції біохімічних процесів швидкість залишається середньою [18].

Рівняння (2.3.1) являє собою рівняння фільтрації, рівняння (2.3.2-2.3.4) описують процес біохімічно-абіотичного окиснення Феруму внаслідок адгезії залізобактерій, що кріпляться на стаціонарній каталітичній оболонці зерен і матриксу міжпорового простору контактного завантаження біореактора та бактерій, які поступають разом із неочищеною водою [36].

Рівняння (2.3.5, 2.3.6) є рівнянням процесу накопичення-передачі матриксу, що утворюється під час роботи на висоті контактного навантаження реактора. Запропонована модель враховує вплив кількості залізобактерій у воді на кінетику їх розвитку в середовищі контактної завантаження біологічного реактора [28].

Рівняння (2.3.2) – показує процес біохімічного окиснення металу нестатичними мікроорганізмами, що поступають із водним потоком, в залежності від іонів гідрокарбонату Феруму, швидкості водного потоку та концентрації неорганічного вуглецю [17].

Під час руху води вздовж завантаження біореактора відбувається процес фіксації бактерій у міжпоровому просторі на поверхні зерен завантаження, покритих первинною нерухомою оболонкою та біо-мінеральних структурах [18]. При розгляданні даного процесу береться до уваги зворотний вплив характеристик процесу [5,34], особливо кількості матриксних структур завантаження реактора та характеристик оточення через коефіцієнт масообміну, пористості та ін. Швидкість вважається середньою через гідродинамку потоку та саморегуляцію біохімічних процесів.

Рівняння (2.3.3) показує збільшення популяції феробактерій з урахуванням швидкості їх фіксації ( $\gamma(x,t) = k \cdot f(M)$ ), іммобілізованих на структурі біомінералів, з водного середовища. У цьому процесі коефіцієнт швидкості фіксації бактерій залежить від іонної сили рідини та величини утворених матриксних структур [36].

Рівняння (2.3.2, 2.3.3) описують те як відбувається відмирання феробактерій, але враховуючи робочий цикл реактора між його промивками та період експотенціального розвитку залізобактерій *Gallionella* до уваги в обчисленнях не беруться.

Рівняння (2.3.4) описує конвективне переміщення по висоті завантаження реактора додаткового джерела вуглецю із його подальшою асиміляцією залізобактеріями роду *Gallionella* [26]. Для одночасного

переміщення та окиснення колоніями рухомих та нерухомих бактерій іонів двовалентних металів використовується рівняння (2.3.5).

Рівняння (2.3.6) описує конвективне переміщення нестатичних матриксних структур із їх подальшим кріпленням у нижніх шарах завантаження біореактора до раніше утворених матриксів.

Рівняння (2.3.7) показує утворення структур матриксу стаціонарними бактеріями із врахуванням збільшення їх популяції через певний часовий період, переміщення водним потоком відірваних матриксів та їх подальшим захопленням і переходом у стаціонарний стан із плавним замощенням міжпорового простору біореактора.

Перша частинка рівняння (2.3.2)  $W(x, t)$  – це швидкість росту мікроорганізмів, описана рівнянням Моно:

$$W(x, t) = \frac{\mu_{max} F \cdot C \cdot Q}{(F + K_F) \cdot (C + K_C) \cdot (Q + K_Q)} \quad (2.3.7)$$

де  $C$  – концентрація додаткового джерела неорганічного вуглецю, мг/дм<sup>3</sup>;  $F(x, t)$  – кількість двовалентних металів у воді зі свердловини, г/м<sup>3</sup>;  $Q$  – концентрація кисню в середовищі біологічного реактора, мг/дм<sup>3</sup>;  $K_F, K_C, K_Q$  – константи насичення, г/м<sup>3</sup>;  $\mu_{max}$  – це максимальна питома швидкість розвитку росту та водних мікроорганізмів, год<sup>-1</sup> [18].

Функція  $H(x, t)$  – це функція, що встановлює зв'язок на одиницю об'єму неочищеної води  $B(x, t)$  між масовою часткою залізобактерій  $B(x, t)$  та середньостатистичною концентрацією бактерій  $U(x, t)$  у міжпоровому просторі матриксу біо-мінералів, а також на площині контактного завантаження реактора [18]:

$$H(x, t) = \begin{cases} B(x, t), & \text{якщо } B(x, t) < B^{**} - U(x, t), \\ B^{**} - U(x, t), & \text{якщо } B(x, t) \geq B^{**} - U(x, t), \end{cases}$$

Функція  $H^*(x, t)$  це функція, що показує перехід матриксу, враховуючи його граничне насичення, із статичного стану в динамічний:

$$H^*(x, t) = \begin{cases} k_2 \cdot M(x, t), & \text{якщо } M(x, t) < M_*^*, \\ k_3 \cdot (M(x, t) - M_*^*), & \text{якщо } M(x, t) \geq M_*^*, \end{cases}$$



де,  $M_*^*$  – максимальна концентрація матриксу в біологічному реакторі,  $\text{г/м}^3$ ;  $B$  – середня концентрація біомаси феробактерій на одиницю об'єму вихідної води, в момент часу, що розглядається, яка проходить через біореактор,  $\text{г/м}^3$ ;  $M$  – загальна концентрація структур матриксу в реакторі на даний момент часу,  $\text{г/м}^3$ ;  $U$  – середнє значення біомаси залізобактерій, що знаходяться на матриксних структурах та поверхні первинної статичної оболонки завантаження в міжпоровому просторі реактора,  $\text{г/м}^3$ ;  $B^{**}$  – гранично допустима величина біомаси бактерій матриксу біологічного реактора,  $\text{г/м}^3$  [18].

Коли в контактному завантаженні біореактора через міжпоровий простір проходить потік води, то реактор, в свою чергу, з плином часу наповнюється матриксними структурами, в результаті чого відбувається їх частковий відрив. Він описується функцією  $k_2 \cdot M(x, t)$  за головної умови, що  $M(x, t) < M_*^*$ . Коли виконується умова  $M(x, t) \geq M_*^*$  (накопичення матриксних структур у міжпоровому просторі біореактору перевищує його максимальну брудомісткість), то відбувається відрив матриксних структур, а також їх подальший перехід у потік води:  $k_3(M(x, t) - M_*^*)$ , де  $k_3$  – коефіцієнт відриву надлишку структур матриксу,  $\text{год}^{-1}$  [17].

Запропонована задача (2.3.2 – 2.3.6) зводиться до розв'язування  $n$  задач на відповідних проміжках часу  $n\Delta t \leq t \leq (n + 1)\Delta t$  аналогічно [5,34]:

$$\sigma(M_n) \frac{\partial B_n}{\partial t} = W_n(x, t) \cdot B_n - v(x) \frac{\partial B_n}{\partial x} - \gamma(x, t) \cdot H_n(x, t) - \chi B_n, \quad (2.3.8)$$

$$\frac{\partial U_n}{\partial t} = W_n(x, t) \cdot U_n + \gamma(x, t) \cdot H_n(x, t) - \chi U_n, \quad (2.3.9)$$

$$\sigma(M_n) \frac{\partial F_n}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial F_n}{\partial x} - \beta_1 W_n(x, t) \cdot B_n - \beta_2 W_n(x, t) \cdot U_n,$$

$$\sigma(M_n) \frac{\partial C_n}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial C_n}{\partial x} - \alpha_1 W_n(x, t) B_n - \alpha_2 W_n(x, t) U_n$$

$$\sigma(M_n) \frac{\partial Q_n}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial Q_n}{\partial x} - \zeta_1 W_n(x, t) B_n - \zeta_2 W_n(x, t) U_n \quad (2.3.10)$$

$$\sigma(M_n) \frac{\partial S_n}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial S_n}{\partial x} - k_1 S_n + H_n^*(x, t) + \eta_1 W_n(x, t) B_n, \quad (2.3.11)$$

$$\frac{\partial M_n}{\partial t} = k_1 S_n - H_n^*(x, t) + \eta_2 W_n(x, t) U_n, \quad (2.3.12)$$

$$W_n(x, t) = \frac{\mu_{\max} F_n(x, t) \cdot C_n(x, t) \cdot Q_n(x, t)}{(F_n(x, t) + K_F) \cdot (C_n(x, t) + K_C) \cdot (Q_n(x, t) + K_Q)}. \quad (2.3.13)$$

Граничні умови даного процесу:

$$B_n \Big|_{x=0} = B_*(t), \quad F_n \Big|_{x=0} = F_*(t), \quad C_n \Big|_{x=0} = C_*(t), \quad Q_n \Big|_{x=0} = Q_*(t), \quad S_n \Big|_{x=0} = S_*(t)$$

Початкові умови відповідно на проміжках часу  $n\Delta t \leq t \leq (n+1)\Delta t$  будуть мати наступний вид:

$$B_n \Big|_{t=n\tau} = B^{**}(x) = \begin{cases} B_0^0(x), n = 0, \\ B_{n-1}(x, n\tau), n > 0, \end{cases}$$

$$U_n^*(x, (n-1)\Delta t) = \begin{cases} U_0^0(x), \text{ якщо } n = 0, \\ U_{n-1}(x, (n-1)\Delta t), \text{ якщо } n > 0 \end{cases},$$

$$F_n \Big|_{t=n\tau} = F_n^* = \begin{cases} F_0^0(x), n = 0, \\ F_{n-1}(x, n\tau), n > 0 \end{cases},$$

$$C_n \Big|_{t=n\tau} = C^{**}(x) = \begin{cases} C_0^0(x), n = 0, \\ C_{n-1}(x, n\tau), n > 0, \end{cases}$$

$$M_n^*(x, (n-1)\Delta t) = \begin{cases} M_0^0(x), \text{ якщо } n = 0, \\ M_{n-1}(x, (n-1)\Delta t), \text{ якщо } n > 0 \end{cases},$$

$$Q_n \Big|_{t=n\tau} = Q^{**}(x) = \begin{cases} Q_0^0(x), n = 0, \\ Q_{n-1}(x, n\tau), n > 0, \end{cases}$$

$$S_n \Big|_{t=n\Delta t} = S_n^* = \begin{cases} S_0^0(x), n = 0, \\ S_{n-1}(x, n\Delta t), n > 0 \end{cases}.$$

$H_n^*$  – це функція за допомогою якої описується процес адгезії матриксних структур в міжпоровому просторі контактного завантаження реактора, із врахуванням його граничного насичення [17]:

$$H_n^*(x, t) = \begin{cases} k_2 M_n(x, t), M_n < M_n^*, \\ k_3 (M_n(x, t) - M_n^*), M_n \geq M_n^*. \end{cases}$$

Функція  $H_n$  – характеризує процес адгезії бактерій із врахуванням граничного насичення залізобактерій на кожному із проміжків часу відповідно  $n\Delta t \leq t \leq (n + 1)\Delta t$ :

$$H_n(x, t) = \begin{cases} B_n(x, t), \text{ якщо } B_n(x, t) < B^{**} - U_n(x, t), \\ B^{**} - U_n(x, t), \text{ якщо } B_n(x, t) \geq B^{**} - U_n(x, t). \end{cases}$$

Беручи до уваги зворотний вплив концентрації матриксних структур в міжпоровому просторі нижньої частини завантаження реактора на пористість середовища, концентрацію сполук двовалентного заліза  $Fe^{2+}$ , матриксних структур та залізобактерій на масообміні коефіцієнти в результаті отримаємо наступні дещо спрощені вирази [36]:

$$\begin{aligned} \sigma(M_{n-1}(x, t - \Delta t)) \frac{\partial B_n}{\partial t} &= W_{n-1}(x, t) B_{n-1}(x, t - \Delta t) - \\ &- v(x) \frac{\partial B_n}{\partial x} - \gamma(x, t) H_{n-1}(x, t) - \chi B_{n-1}(x, t - \Delta t), \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_n}{\partial t} &= W_{n-1}(x, t) U_{n-1}(x, t - \Delta t) + \gamma(x, t) H_{n-1}(x, t) - \chi U_{n-1}(x, t - \Delta t), \end{aligned} \quad (2.3.15)$$

$$\begin{aligned} \sigma(M_{n-1}(x, t - \Delta t)) \frac{\partial F_n}{\partial t} &= -v(x) \frac{\partial F_n}{\partial x} - \beta_1 W_{n-1}(x, t) B_{n-1}(x, t - \Delta t) - \\ &- \beta_2 W_{n-1}(x, t) U_{n-1}(x, t - \Delta t) \end{aligned} \quad (2.3.16)$$

$$\begin{aligned} \sigma(M_{n-1}(x, t - \Delta t)) \frac{\partial C_n}{\partial t} &= -v(x) \frac{\partial C_n}{\partial x} - \alpha_1 W_{n-1}(x, t) B_{n-1}(x, t - \Delta t) - \\ &- \alpha_2 W_{n-1}(x, t) U_{n-1}(x, t - \Delta t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma(M_{n-1}(x, t - \Delta t)) \frac{\partial Q_n}{\partial t} &= -v(x) \frac{\partial Q_n}{\partial x} - \zeta_1 W_{n-1}(x, t) B_{n-1}(x, t - \Delta t) - \\ &- \zeta_2 W_{n-1}(x, t) U_{n-1}(x, t - \Delta t), \end{aligned}$$

$$\sigma(M_{n-1}(x, t - \Delta t)) \frac{\partial S_n}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial S_n}{\partial x} - k_1 S_{n-1}(x, t - \Delta t) + H_{n-1}^*(x, t) + \\ + \eta_1 W_{n-1}(x, t) B_{n-1}(x, t - \Delta t), \quad (2.3.17)$$

$$\frac{\partial M_n}{\partial t} = k_1 S_{n-1}(x, t - \Delta t) - H_{n-1}^*(x, t) + \eta_2 W_{n-1}(x, t) U_{n-1}(x, t - \Delta t), \quad (2.3.18)$$

$$W_{n-1}(x, t) = \frac{\mu_{\max} F_{n-1}(x, t) \cdot C_{n-1}(x, t) \cdot Q_{n-1}(x, t)}{(F_{n-1}(x, t - \Delta t) + K_F) \cdot (C_{n-1}(x, t - \Delta t) + K_C) \cdot (Q_{n-1}(x, t - \Delta t) + K_Q)}, \quad (2.3.19)$$

$$H_{n-1}(x, t) = \begin{cases} B_{n-1}(x, t - \Delta t), & \text{якщо } B_{n-1}(x, t - \Delta t) < B^{**} - U_{n-1}(x, t - \Delta t), \\ B^{**} - U_{n-1}(x, t - \Delta t), & \text{якщо } B_{n-1}(x, t - \Delta t) \geq B^{**} - U_{n-1}(x, t - \Delta t). \end{cases}$$

$$H_{n-1}^*(x, t) = \begin{cases} k_2 M_{n-1}(x, t - \Delta t), & \text{якщо } M_{n-1}(x, t - \Delta t) < M_*^*, \\ k_3 (M_{n-1}(x, t - \Delta t) - M_*^*), & \text{якщо } M_{n-1}(x, t - \Delta t) \geq M_*^*. \end{cases}$$

Граничні та початкові та умови не змінюються. Зазначимо, що для кожної із задач складові масообміну відповідно на проміжках часу  $n\Delta t \leq t \leq (n+1)\Delta t$ , в даному випадку, функції відомі та коефіцієнт пористості – це величина стала на кожному наступному етапі та секції біологічного реактора [17].

Рівняння (2.3.14, 2.3.16, 2.3.17) – це лінійні неоднорідні диференціальні рівняння з частинними похідними першого порядку. Такі рівняння розв’язуються методом характеристик, так само як [5, 19].

$$B_n(x, t) = \begin{cases} \int_0^x \frac{g_n(\tilde{x}, \sigma_n f(\tilde{x}) - \sigma_n f(x) + t)}{v(\tilde{x})} d\tilde{x} + B_*(t - \sigma_n f(x)), & t \geq \sigma_n f(x), \\ \frac{1}{\sigma_n} \int_{n\Delta t}^t g_n \left( f^{-1} \left( \frac{\sigma_n f(x) - t + \tilde{t}}{\sigma_n} \right), \tilde{t} \right) d\tilde{t} + B_*^* \left( f^{-1} \left( \frac{\sigma_n f(x) - t}{\sigma_n} \right) \right), & t < \sigma_n f(x), \end{cases} \quad (2.3.20)$$

$$F_n(x, t) = \begin{cases} \int_0^x \frac{Fg_n(\tilde{x}, \sigma_n f(\tilde{x}) - \sigma_n f(x) + t)}{\nu(\tilde{x})} d\tilde{x} + F_*(t - \sigma_n f(x)), & t \geq \sigma_n f(x), \\ \frac{1}{\sigma_n} \int_{n\Delta t}^t Fg_n\left(f^{-1}\left(\frac{\sigma_n f(x) - t + \tilde{t}}{\sigma_n}\right), \tilde{t}\right) d\tilde{t} + F_*^*\left(f^{-1}\left(\frac{\sigma_n f(x) - t}{\sigma_n}\right)\right), & t < \sigma_n f(x), \end{cases} \quad (2.3.21)$$

$$C_n(x, t) = \begin{cases} \int_0^x \frac{Cg_n(\tilde{x}, \sigma_n f(\tilde{x}) - \sigma_n f(x) + t)}{\nu(\tilde{x})} d\tilde{x} + C_*(t - \sigma_n f(x)), & t \geq \sigma_n f(x), \\ \frac{1}{\sigma_n} \int_{n\Delta t}^t Cg_n\left(f^{-1}\left(\frac{\sigma_n f(x) - t + \tilde{t}}{\sigma_n}\right), \tilde{t}\right) d\tilde{t} + C_*^*\left(f^{-1}\left(\frac{\sigma_n f(x) - t}{\sigma_n}\right)\right), & t < \sigma_n f(x), \end{cases}$$

$$Q_n(x, t) = \begin{cases} \int_0^x \frac{Qg_n(\tilde{x}, \sigma_n f(\tilde{x}) - \sigma_n f(x) + t)}{\nu(\tilde{x})} d\tilde{x} + Q_*(t - \sigma_n f(x)), & t \geq \sigma_n f(x), \\ \frac{1}{\sigma_n} \int_{n\Delta t}^t Qg_n\left(f^{-1}\left(\frac{\sigma_n f(x) - t + \tilde{t}}{\sigma_n}\right), \tilde{t}\right) d\tilde{t} + Q_*^*\left(f^{-1}\left(\frac{\sigma_n f(x) - t}{\sigma_n}\right)\right), & t < \sigma_n f(x), \end{cases}$$

$$S_n(x, t) = \begin{cases} \int_0^x \frac{Sg_n(\tilde{x}, \sigma_n f(\tilde{x}) - \sigma_n f(x) + t)}{\nu(\tilde{x})} d\tilde{x} + S_*(t - \sigma_n f(x)), & t \geq \sigma_n f(x), \\ \frac{1}{\sigma_n} \int_{n\Delta t}^t Sg_n\left(f^{-1}\left(\frac{\sigma_n f(x) - t + \tilde{t}}{\sigma_n}\right), \tilde{t}\right) d\tilde{t} + S_*^*\left(f^{-1}\left(\frac{\sigma_n f(x) - t}{\sigma_n}\right)\right), & t < \sigma_n f(x), \end{cases} \quad (2.3.22)$$

де

$$Fg_n(x, t) = -\beta_n W_{n-1}\left(x - f^{-1}(\Delta t), t\right) B_{n-1}\left(x - f^{-1}(\Delta t), t - \Delta t\right) - \beta_2 W_{n-1}\left(x - f^{-1}(\Delta t), t\right) U_{n-1}\left(x - f^{-1}(\Delta t), t - \Delta t\right),$$

$$Cg_n(x, t) = -\alpha_n W_{n-1}\left(x - f^{-1}(\Delta t), t\right) B_{n-1}\left(x - f^{-1}(\Delta t), t - \Delta t\right) - \alpha_2 W_{n-1}\left(x - f^{-1}(\Delta t), t\right) U_{n-1}\left(x - f^{-1}(\Delta t), t - \Delta t\right),$$

$$Qg_n(x, t) = -\zeta_n W_{n-1}\left(x - f^{-1}(\Delta t), t\right) B_{n-1}\left(x - f^{-1}(\Delta t), t - \Delta t\right) - \zeta_2 W_{n-1}\left(x - f^{-1}(\Delta t), t\right) U_{n-1}\left(x - f^{-1}(\Delta t), t - \Delta t\right),$$

$$Sg_n(x, t) = \eta_1 W_{n-1}(x - f^{-1}(\tau), t) B_{n-1}(x - f^{-1}(\tau), t - \Delta t) + M_{n-1}^*(x - f^{-1}(\tau), t) - k_1 S_{n-1}(x - f^{-1}(\tau), t - \Delta t)$$

Рівняння (2.3.15) та (2.3.18) – це звичайні диференціальні рівняння з відокремленими змінними. Взявши до уваги відповідні початкові умови, маємо такі вирази [33]:

$$U_n(x, t) = \int_{(n-1)\Delta t}^t (W_{n-1}(x - f^{-1}(\Delta t), s - \Delta t) \cdot U_{n-1}(x - f^{-1}(\Delta t), s - \Delta t)) ds - \chi U_{n-1}(x - f^{-1}(\Delta t), t - \Delta t) + \gamma(x, t) H_{n-1}(x, s) ds + U_n^*(x, (n-1)\Delta t), \quad (2.3.23)$$

$$M_n(x, t) = \int_{(n-1)\Delta t}^t (\eta_2 W_n(x - f^{-1}(\Delta t), s - \Delta t) U_n(x - f^{-1}(\Delta t), s - \Delta t) + k_1 S_n(x - f^{-1}(\Delta t), s - \Delta t) - H_{n-1}^*(x - f^{-1}(\Delta t), s)) ds + M_n^*(x, (n-1)\Delta t), \quad (2.3.24)$$

де  $\Delta t$  – це час, на протязі якого головні характеристики середовища залишаються майже не змінними. Його значення залежне від попередньо заданої точності [12].

Початкове значення  $\Delta t$  встановлюється інтуїтивно і повністю визначається протягом процесу розв'язання задачі за допомогою числових методів та забезпечує збіжність так само як і в алгоритмі [5, 19], [18].

#### **2.4. Математичне моделювання сингулярно збурених процесів зnezalіzнення підземних вод**

У зв'язку з високим вмістом у підземних водах сполук металів, які дуже шкідливі для здоров'я людини, важливим стало питання розробки спеціальних технологій для забезпечення ефективного очищення підземних вод від цих сполук.

Сингулярно збурені диференціальні рівняння можна використовувати для математичного моделювання процесів і явищ, у яких, за відносно короткий проміжок часу, досить швидко відбувається зміна величин. Вирішено

асимптотичну задачу сингулярного збурення. Розв'язуються дані задачі за допомогою асимптотичного методу, тому що він дієвий при розв'язуванні рівнянь різних типів [6].

Широке використання математичного моделювання та розвиток методів системного аналізу доводять можливості практичного застосування асимптотичних методів у дослідженні моделей. Якщо вміло використовувати асимптотичні методи для вирішення складних задач, то можна значно оптимізувати використання машинного часу. Асимптотичний метод дозволяє записати наближені розв'язки досить складних прикладних задач в аналітичній формі [4].

Математична сингулярно збурена модель біологічного процесу видалення металів з підземних водних горизонтів представлена задачею Коші для системи нелінійних диференціальних рівнянь з частинними похідними 2 порядку [6, 7]:

$$V = -\theta(M)gradP, \quad (2.4.1)$$

$$\sigma(M) \frac{\partial B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 B}{\partial x^2} + W(x,t)B - v(x) \frac{\partial B}{\partial x} - \gamma(x,t)H(x,t) - \chi B, \quad (2.4.2)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D_U \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + W(x,t)U + \gamma(x,t) \cdot H(x,t) - \chi U, \quad (2.4.3)$$

$$\sigma(M) \frac{\partial F}{\partial t} = D_F \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} - v(x) \frac{\partial F}{\partial x} - \beta_1 W(x,t)B - \beta_2 W(x,t)U - R_{chem}, \quad (2.4.4)$$

$$\sigma(M) \frac{\partial S}{\partial t} = D \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - v(x) \frac{\partial S}{\partial x} - k_1 S + H^*(x,t) + \eta_1 W(x,t)B, \quad (2.4.5)$$

$$\frac{\partial M}{\partial t} = k_1 S - H^*(x,t) + \eta_2 W(x,t)U. \quad (2.4.6)$$

$$W(x,t) = \frac{\mu_{max} F(x,t)}{(F(x,t) + K_F)},$$

$$H(x,t) = \begin{cases} B(x,t), & \text{якщо } B(x,t) < B^{**} - U(x,t), \\ B^{**} - U(x,t), & \text{якщо } B(x,t) \geq B^{**} - U(x,t), \end{cases}$$

$$H^*(x, t) = \begin{cases} k_2 \cdot M(x, t), & \text{якщо } M(x, t) < M_*^*, \\ k_3 \cdot (M(x, t) - M_*^*), & \text{якщо } M(x, t) \geq M_*^*. \end{cases}$$

де  $T$  – ефективний час роботи очисного фільтра, що дорівнює часу досягнення біореактором максимального насичення забруднення під час процесу розв’язання задачі;  $x \in (0, l)$  – висота робочої частини біологічного реактора,  $t \in (0, T)$ ;  $M_*^*$  – максимальна концентрація матриксу в біореакторі (максимальна брудомісткість);  $M$  – загальна кількість матриксних структур в біореакторі за розглянутий час,  $U$  – середнє значення біомаси залізобактерій закріплених на поверхні первинної статичної оболонки матриксних структур та контактного завантаження в міжпоровому просторі реактора,  $V$  – середнє значення біомаси бактерій в одній одиниці об’єму вихідної води, що протікає через біологічний реактор,  $V^{**}$  – граничне значення біомаси феробактерій в структурах матриксу біореактора [29].

Функція  $W(x, t)$  зображує швидкість росту мікроорганізмів в біологічному реакторі відповідно з рівнянням Моно;  $F(x, t)$  – концентрація двовалентних металів у вихідній воді;  $\mu_{\max}$  – максимально можлива питома швидкість росту мікроорганізмів;  $K_F$  – константа насичення.

Функція  $H(x, t)$  – це функція, що встановлює зв’язок на одиницю об’єму неочищеної води  $B(x, t)$  між масовою часткою залізобактерій  $B(x, t)$  та середньостатистичною концентрацією бактерій  $U(x, t)$  у міжпоровому просторі матриксу біо-мінералів, а також на площині контактного завантаження реактора [17].

Функція  $H^*(x, t)$  зображує перехід матриксних структур з урахуванням граничного насичення в динамічний стан із стаціонарного [18],  $P$  – тиск,  $\theta(M)$  – коефіцієнт фільтрації;  $\gamma$  – функція швидкості кріплення залізобактерій на контактному завантаженні та структурах матриксу,  $V$  – швидкість водного потоку в біологічному реакторі,  $\chi$  – коефіцієнт швидкості відмирання



феробактерій,  $k_1$  – коефіцієнт, зображує частку матриксу, яка переходять в стаціонарний стан із динамічного,  $k_2$  – коефіцієнт який описує частку матриксу, що переходить в динамічний стані з стаціонарного,  $k_3$  – коефіцієнт що показує частку відриву надлишку структур матриксу,  $\eta_1, \eta_2$  – масова частка тривалентного Феруму  $Fe^{3+}$  у вигляді біомінералів ( $\gamma FeOOH$ ) створена залізобактеріями, іммобілізованими на статичних структурах матриксу в міжпоровому просторі реактора та залізобактерій у водному потоці відповідно при побудові 1 г біомаси [17],  $\beta_1, \beta_2$  – коефіцієнти масової частки йонів двовалентного заліза  $Fe^{2+}$ , потрібних для побудови 1 г клітинної біомаси,  $D_B, D_u, D_F$  – відповідно коефіцієнти дифузії бактерій, що знаходяться у водному потоці, іммобілізованих бактерій та іонів двовалентного Феруму  $Fe^{2+}$ ,  $D_B = \varepsilon \cdot D_B^*$ ,  $D_U = \varepsilon \cdot D_U^*$ ,  $D_F = \varepsilon \cdot D_F^*$ ,  $\varepsilon$  – це коефіцієнт конвективної дифузії (малий параметр) [18].

Запропонована сингулярно збурена задача розв'язується аналогічно до [5,34] у виді асимптотичних наближень рядами.

Слід зазначити, що завдяки біологічним методам можна відмовитися від застосування хімічних реагентів; досліджувати процес очистки підземних вод від сполук металів при кількості кисню, розчиненого у воді, 3-4 мг/дм<sup>3</sup>; не застосовувати дегазацію від діоксиду вуглецю підземних вод [4].

**РОЗДІЛ III. МЕТОДОЛОГІЧНІ ОСНОВИ ВИКЛАДАННЯ  
ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ  
СИНГУЛЯРНО ЗБУРЕНИХ ПРОЦЕСІВ ОЧИЩЕННЯ ПІДЗЕМНИХ  
ВОД НА БІОРЕАКТОРАХ В РАМКАХ РОБОТИ У КЛАСАХ З  
ПОГЛИБЛЕНИМ ВИВЧЕННЯМ МАТЕМАТИКИ**

**3.1. Прикладне застосування ДРЧП в шкільному курсі математики  
старших класів та гуртках МАН**

Прикладна концепція математичних знань відіграє велику роль у навчанні та вихованні учнів 11 класів, в тому числі підготовці школярів у математичних гуртках Малої академії наук. Отримані в цих групах знання значно поглиблюють відомості із шкільного курсу математики та інших предметів, таких як фізика, біологія, екологія, інформатика, хімія і т. д. та дозволяючи використовувати математичні прилади та комп'ютери для вдосконалення і вивчення певних фізичних екологічних, та соціально-економічних процесів і явищ [24].

Прикладна скерованість математичної шкільної програми відіграє важливу роль у професійно-орієнтованих класах, при розв'язанні соціально-економічних, технічних, екологічних та фізичних задач і математичних моделей. На жаль, прикладній орієнтації шкільного курсу математики не відведено достатньої уваги у програмах рівня стандарт, навіть у класах з поглибленим вивченням математики. Елементи теорії ймовірностей та комбінаторики, математичної статистики, інтегральне та диференціальне числення, тощо – це розділи математичного аналізу з немалим прикладним спрямуванням. Але, на жаль, за останні роки на них звертають все менше уваги. Саме тому покращення методики викладання і вивчення цієї теми, добір теорії, цікавих прикладних задач було і буде актуальним питанням сучасної математичної дидактики [22].

Прикладна скерованість шкільної програми з курсу математики є однією з головних педагогічних проблем, що забезпечують якісну мотивацію при вивченні математики. Саме тому проблема реалізації прикладної спрямованості буде завжди перебувати в полі зору вчителів, науковців, методистів та авторів шкільних підручників і наукової літератури [23].

У дослідженнях з педагогіки прикладну спрямованість математики розглядають як методологічний та змістовний зв'язок шкільного програми з практикою, що зумовлює в учнів формування вмінь та навичок, які необхідні для розв'язання математичними способами практичних задач.

Із використанням абстракції з реального світу виводиться основне положення математики. У науці вони спочатку отримали самостійний логічний розвиток, а пізніше знайшли свої застосування в людській трудовій діяльності. Даний певним чином відображається в методиці навчання математики. Необхідно показати учням використання математики в житті та праці людини; навчити застосовувати математичні знання для виконання обчислень, графічних і вимірювальних завдань. Це, в свою чергу, призводить до того, інтерес учнів до вивчення предмету математики підвищується, також закладається міцний фундамент для чіткого розуміння значення в житті людей математичних знань [23].

Поки що використання прикладних задач недостатньо вивчено. Але це можна простежити ще з радянських часів.

В свою чергу, застосування комп'ютерної техніки у процесі навчання дає змогу найбільше активізувати пізнавальну учнівську діяльність. Правильно організована комп'ютерна підтримка має значний навчальний ефект, оскільки може розширити можливості персоналізованого навчання, зменшити час і підвищити рівень підготовки педагога до уроку [25].

Комп'ютери є корисними та невід'ємними інструментами для досліджень в галузі математики. З його застосуванням можна швидше експериментально дослідити нові цікаві геометричні та аналітичні залежності

[23]. Для того щоб розв'язати технічні та екологічні, фізичні, економіко-математичні задачі - учневі потрібно лише проаналізувати існуючі розв'язки, а також дати науково-обґрунтовані, якісні висновки.

В основному прикладна спрямованість вивчення математики відображається у дослідженні та розв'язанні прикладних задач. Основними вимогами до прикладних задач, що застосовуються під час вивчення шкільного курсу математики є [23]:

- Завдання повинно мати дійсне практичне значення, яке може проілюструвати реальну цінність і значимість набутих знань з математики.
- За змістом і формулюванням фактів та методів, завдання мають відповідати шкільним підручникам і програмам, які використовуватимуться під час їх розв'язування.
- Завдання має бути сформульовано чітко і зрозумілою мовою, не містить термінів, яких учень раніше не бачив і потребують додаткового пояснення.
- Числові дані в таких завданнях повинні бути реальними і відповідати дійсним фактам.
- Зміст запитання має максимально відображати особистий досвід учня. Місцеві матеріали можуть ефективно продемонструвати використання математичних знань та стимулювати пізнавальний інтерес учнів.
- Прикладне завдання має відображати стан економіки та торгівлі, промислового та сільськогосподарського виробництва, пояснювати застосування математичних знань у конкретній людській професії.

Як правило, числові дані у прикладних задачах, повинні бути приблизними, а для їх розв'язування потрібні розрахункові засоби, включаючи комп'ютери [30].

Під час розв'язування прикладних завдань, в тому числі гуртках МАН, їх формулювання можуть бути дещо розширені, представляючи собою деякі

теоретичні зведення до досліджуваної проблеми. Сама ж проблема, як правило, може мати багатоетапний розв'язок, де слідуючий етап при цьому буде розвиває і доповнювати попередній [23].

Оскільки математичне моделювання є фундаментом розв'язку прикладних, то для здійснення прикладної спрямованості потрібно організувати навчання учнів з використанням елементів моделювання, що з точки зору дидактики є навчальними та виховними діями, які виконуються під час виконання задач з математики [22, с.25]. Інакше кажучи, потрібно навчити учнів створювати та розв'язувати математичні моделі.

Відповідно, математична модель – це абстракція реальності, в якій відношення між дійсними елементами, тобто відношення між елементами, які цікавлять дослідників, замінюється зв'язком між категоріями математики. Ці зв'язки зазвичай виражаються у вигляді рівнянь або нерівностей, тобто формальних логічних зв'язків між показниками, що характеризують функціонал дійсної системи, що моделюються.

### **3.2. Основні поняття про регулярно та сингулярно збурені математичні моделі.**

Математика використовує математичні моделі для вивчення процесів, які відбуваються в реальному світі. Всі математичні моделі є наближеними. Звісно, створюючи математичну модель дослідник сподівається розробити таку модель, яка відбиває найважливіші аспекти процесу. З іншої сторони, математична модель повинна бути достатньо простою для дослідження, а також дозволяти наявною інформацією та засобами досліджувати той чи інший процес або ж явище. Саме тому деякі фактори, які мають менший вплив на досліджувану ситуацію, не враховуються, а отже, деякі компоненти процесу в математичній моделі непередставлені [29].

Природно задатися питанням про роль факторів, що не враховуються: чи є їх вплив на процес несуттєвим або ж, не зважаючи на те, що їх масштаби

невеликі, загальний вплив на досліджуваний процес буде значним, тобто докорінно змінить інформацію про процес, яка отримується в результаті побудови математичної моделі [7].

Для того щоб відповісти на це питання, нам потрібно створити більш розширену модель, яка бере до уваги всі фактори, які не представлені в спрощеній моделі. Після чого нам залишається дослідити питання наближених розв'язків, що отримуються із спрощеної розширеної моделі [4,5].

Врахування малих факторів призводить до появи додаткових членів з малими множниками в розширеній моделі, порівняно зі спрощеною моделлю, що показує малість цих факторів. Задані малі множники є *малими параметрами*.

Якщо математична модель є диференціальним рівнянням, то проблема впливу малих параметрів на процес дослідження полягає у вивченні залежності розв'язку диференціального рівняння від малих параметрів. Члени рівняння, що містять у собі малі параметри називаються *збуреннями*.

Початкове рівняння, яке не містить цих доданків, є *незбуреним рівнянням*, а розширене рівняння є *збуреним рівнянням* або *рівнянням зі збуреннями* [28,29].

Збурення, які спостерігаються у математичній моделі, можна розділити на дві категорії [4]:

1. *Сингулярні* - збурення, що призводять до значних змін у розв'язку незбуреної задачі.
2. *Регулярні* – збурення, що призводять до невеликих змін розв'язку незбуреної задачі.

Формально означимо ці збурення. Для цього розглянемо спочатку два наступних рівняння:

$$A_0: F_0 u = f_0$$

$$A_\varepsilon: F_0 u + \varepsilon F_1 u = f_0 + \varepsilon f_1,$$

де  $F_0$  і  $F_1$  – це деякі задані наперед оператори;  $\varepsilon$  – малий параметр,  $\varepsilon > 0$  хоча дуже малий;  $f_0$  і  $f_1$  – це певні визначені неперервні диференційовані функції;  $u = u(x)$  – невідома або ж шукана функція, що відповідає за деяку характеристику заданого процесу (може бути багатомірною і одномірною функцією) [7].

Доданки  $\varepsilon F_1 u$  і  $\varepsilon f_1$  – це члени рівняння, які відповідальні за збурення.

$A_0$  – це рівняння, яке можна описати як деяку спрощену модель певного спрощеного процесу, а рівняння  $A_\varepsilon$  – як відповідну йому розширену модель даного процесу.

Якщо ж задані рівняння  $A_0$  і  $A_\varepsilon$  є диференціальними, то варто дописати граничні чи початкові умови, які, в свою чергу, також можуть містити в собі малі параметри.

Враховуючи диференціальні рівняння та відповідні їм умови мова йтиме про задачі  $A_0$  та  $A_\varepsilon$ .

Нехай дані задачі  $A_0$  та  $A_\varepsilon$  розглядаються в певній області  $D$ , тоді  $u = u(x)$ ,  $x \in D$ .

Розв'язок задачі  $A_\varepsilon$  позначимо через  $u_\varepsilon(x)$  – розв'язок збуреної задачі, а, відповідно, розв'язок задачі  $A_0$  позначимо  $u_0(x)$  – розв'язок незбуреної задачі [28].

**Головне питання теорії збурень:** чи спостерігатиметься різниця  $u_0(x) - u_\varepsilon(x) \rightarrow 0$  в тій чи іншій нормі, при  $\varepsilon > 0$ . Можна побачити, що відповідь на дане запитання залежить від вибору норми, у подальшому під нормою вектора матимемо на увазі  $u(x) = (u_1(x), u_2(x), \dots, u_n(x))$ , де  $u(x)$  – це вектор функція. В майбутньому розглянемо Евклідову норму, значення якої можна знайти за допомогою формули:  $\|u(x)\| = \sqrt{u_1^2(x) + u_2^2(x) + \dots + u_n^2(x)}$ . Якщо  $u(x)$  – скалярна функція, то  $\|u(x)\| = |u(x)|$ . Очевидно, що норма залежить від значення [7].

Дамо означення сингулярного та регулярного збурення.

Задача  $A_\varepsilon$  зветься **регулярно збуреною**, якщо виконується наступна умова:

$$\sup_D \|u_\varepsilon(x) - u_0(x)\| \rightarrow 0, \quad \varepsilon > 0.$$

Інакше задача зветься **сингулярно збуреною**. Із означення випливає, що  $u_0(x)$  – розв’язок у випадку регулярно збуреної задачі  $A_0$ , який при малих  $\varepsilon$ , буде наближенням до розв’язку  $u_\varepsilon(x)$  задачі  $A_\varepsilon$  по всій області  $D$ . У випадку, коли задача  $A_0$  – сингулярно збурена, то, при малих  $\varepsilon$ , розв’язок  $u_0(x)$  не буде близьким до розв’язку  $u_\varepsilon(x)$ , по крайній мірі в певній частині заданої області  $D$ . Розглянемо на прикладах [29].

**Приклад 1.** Розглянемо задачу Коші для диференціального рівняння [28]:

$$\frac{du}{dx} = -u + \varepsilon x \quad \left| \begin{array}{l} 0 \leq x \leq 1, \\ u(0) = 1. \end{array} \right.$$

Розглянемо відповідну збурену задачу.

$$A_\varepsilon: \frac{du}{dx} = -u + \varepsilon x; \quad 0 \leq x \leq 1; \quad u(0) = 1;$$

$$u' + u = \varepsilon x.$$

Розв’яжемо це диференціальне рівняння за допомогою методу Лагранжа. Далі розглянемо відповідне йому однорідне рівняння.

$$u' + u = 0;$$

$$\frac{du}{dx} = -u;$$

$$\frac{du}{u} = -dx;$$

$$\int \frac{du}{u} = - \int dx;$$

$$\ln u = -x + c_1;$$

$$u = c e^{-x};$$

$$u_\varepsilon = c(x) \cdot e^{-x};$$

$$u'_\varepsilon = c'(x) \cdot e^{-x} - c(x) \cdot e^{-x};$$

$$c'(x) \cdot e^{-x} - c(x) \cdot e^{-x} + c(x) \cdot e^{-x} = \varepsilon x$$



$$c'(x) \cdot e^{-x} = \varepsilon x;$$

$$c'(x) = \varepsilon x \cdot e^x;$$

$$c(x) = \varepsilon \int x e^x dx = \varepsilon \left| \begin{array}{l} u = x, du = dx \\ e^x dx = dv, v = e^x \end{array} \right| = \varepsilon(xe^x - e^x) + \varepsilon c^*;$$

$$u_\varepsilon = \varepsilon x - \varepsilon + \varepsilon c^* \cdot e^x;$$

$$1 = -\varepsilon + \varepsilon c^*;$$

$$c^* = \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon};$$

$$u_\varepsilon = \varepsilon x - \varepsilon + (1 + \varepsilon)e^{-x};$$

Розглянемо незбурену задачу.

$$A_0: \frac{du}{dx} = -u;$$

$$\frac{du}{u} = -dx;$$

$$\int \frac{du}{u} = - \int dx;$$

$$\ln u = -x + c;$$

$$u = c \cdot e^{-x};$$

$$1 = c;$$

$$u_0(x) = e^{-x};$$

Отримавши розв'язки незбуреної та збуреної задач знайдемо:

$$\begin{aligned} \sup \|u_\varepsilon(x) - u_0(x)\| &= \sup |\varepsilon x - \varepsilon + e^x + \varepsilon e^{-x} - e^{-x}| = \varepsilon \sup |x - 1 + e^{-x}| = \\ &= \varepsilon \max |x - 1 + e^{-x}| = \varepsilon \cdot e^{-1} \Rightarrow 0, \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Отже, дане збурення є регулярним.

Розглянемо задачі такого роду в загальному випадку:

$$\frac{du}{dx} = f(u, x, \varepsilon), \quad x \in D, \quad u(x_0) = k$$

Якщо функція  $f$  визначена неперервно-диференційована в заданій області  $D$ , а область  $D$ , в свою чергу, обмежена, замкнена, то такого роду задача регулярно-збурена. Якщо ж область  $D$  – необмежена, то дана задача може стати сингулярно-збуреною [28].

Функція  $u$  може бути вектор-функцією.

**Приклад 2.** Розглянемо задачу Коші для скалярного диференціального рівняння у якого малий параметр  $\varepsilon > 0$  – це множник при похідній [28].

$$\varepsilon \frac{du}{dx} = -u + x \quad \left| \begin{array}{l} 0 \leq x \leq 1, \\ u(0) = 1. \end{array} \right.$$

Розглянемо збурену задачу.

$$A_\varepsilon: \varepsilon \frac{du}{dx} = -u + x, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad u(0) = 1$$

$$\frac{du}{dx} + \frac{u}{\varepsilon} = \frac{x}{\varepsilon},$$

Знайдемо розв'язки цього диференціального рівняння за допомогою методу Лагранжа. Далі розглянемо відповідне йому однорідне рівняння [7].

$$\frac{du}{dx} + \frac{u}{\varepsilon} = 0$$

$$\frac{du}{dx} = -\frac{u}{\varepsilon} * \frac{dx}{u}$$

$$\frac{du}{du} = \frac{-dx}{\varepsilon}$$

$$\int \frac{du}{du} = - \int \frac{dx}{\varepsilon}$$

$$\ln|u| = -\frac{x}{\varepsilon} + c^*$$

$$u = c \cdot e^{-\frac{x}{\varepsilon}}$$

$$u_\varepsilon = c(x) \cdot e^{-\frac{x}{\varepsilon}}$$

$$u'_\varepsilon = c'(x) \cdot e^{-\frac{x}{\varepsilon}} - \frac{1}{\varepsilon} \cdot c(x) \cdot e^{-\frac{x}{\varepsilon}}$$

$$\varepsilon c'(x) \cdot e^{-\frac{x}{\varepsilon}} - c(x) \cdot e^{-\frac{x}{\varepsilon}} + c(x) \cdot e^{-\frac{x}{\varepsilon}} = x$$

$$\varepsilon c'(x) \cdot e^{-\frac{x}{\varepsilon}} = x$$

$$c'(x) = \frac{x}{\varepsilon} e^{\frac{x}{\varepsilon}}$$

$$c(x) = \int \frac{x}{\varepsilon} e^{\frac{x}{\varepsilon}} dx = \left| \begin{array}{l} \frac{x}{\varepsilon} = t \\ dx = \varepsilon dt \end{array} \right| = \varepsilon \int t e^t dt = \varepsilon \left| \begin{array}{l} t = u \quad dt = du \\ dv = \varepsilon v = e^t \end{array} \right| =$$

$$= \varepsilon(te^t - e^t + c) = \varepsilon \left( e^{\frac{x}{\varepsilon}} \left( \frac{x}{\varepsilon} - 1 \right) + c \right)$$

$$u_\varepsilon = x - \varepsilon + \varepsilon e^{-\frac{x}{\varepsilon}} \cdot c$$

$$1 = -\varepsilon c + c e^{-\frac{x}{\varepsilon}}$$

$$c = -\frac{1 + \varepsilon}{\varepsilon}$$

$$u_\varepsilon = (x - \varepsilon) + (1 + \varepsilon) \cdot e^{-\frac{x}{\varepsilon}}$$

Розглянемо незбурену задачу.

$$A_0: u = x$$

$$u_0 = x$$

Отримавши розв'язки незбуреної та збуреної задачі знайдемо:

$$\sup_{[0;1]} \left\| (x - \varepsilon) + (1 + \varepsilon) \cdot e^{-\frac{x}{\varepsilon}} - x \right\| = \sup_{[0;1]} \left\| -\varepsilon + e^{-\frac{x}{\varepsilon}} + \varepsilon \cdot e^{-\frac{x}{\varepsilon}} \right\| = 1$$

Задача Коші є сингулярно-збуреною.

Зобразимо графічно наступною ілюстрацією (рис 3.1).

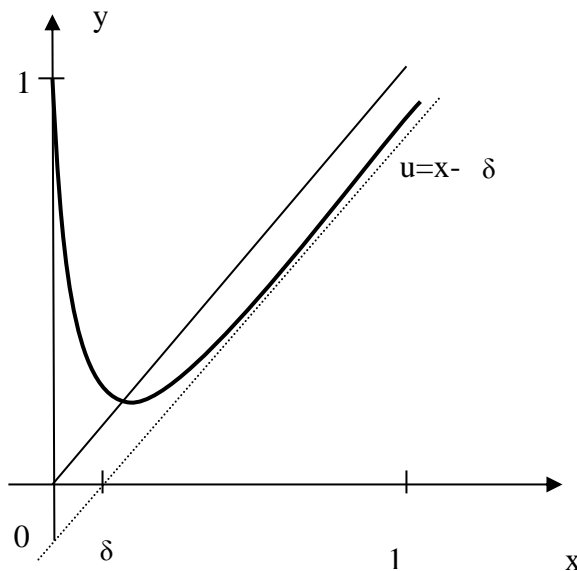


Рис. 3.1.

Відзначимо дві особливості даної задачі:

- 1) Рівняння  $A_0$  - не буде диференціальним рівнянням, тобто коли  $\varepsilon = 0$ , рівняння  $A_\varepsilon$  вироджується у форму алгебраїчного рівняння  $A_0$  [7].

2) Розв'язок  $u_0(x)$  рівняння  $A_0$  при малих  $\varepsilon$  не є близьким до розв'язку  $u_\varepsilon(x)$  задачі  $A_\varepsilon$  лише в малому  $\delta$  околі на відрізку  $[\delta, 1]$  початкові точки  $A$  розв'язку  $u_0(x)$  є достатньо близьким до  $u_\varepsilon(x)$ .

Означення. Проміжок  $[0, \delta]$  на якому проходить швидке відхилення розв'язку  $u_\varepsilon(x)$  від початкового значення до значень близьких до  $u_0(x)$  називають **пограничним шаром** [7].

Типовим представниками сингулярно-збурених задач можна вважати диференціальне рівняння з малими параметрами при похідних, для розв'язків яких характерний пограничний шар [8].

Головною проблемою в даному випадку постає побудова наближення до розв'язку  $U_\varepsilon(x)$ , яке потрібним чином підійде нам як поза межами пограничного шару так і в ньому, точніше буде наближати розв'язок рівномірно при всіх значеннях змінної  $x$  [28].

Дане наближення має асимптотичний характер. Узагальненням другого прикладу є *Тихонівська система диференціальних рівнянь* [7]:

$$\begin{cases} z'(x) = F(x, y, z, \varepsilon) \\ y'(x) = f(x, y, z, \varepsilon) \end{cases}; \\ 0 \leq x \leq x^0; \\ z(0) = z^0; y(0) = y^0$$

Приклад 3. Розглянемо рівняння з частинними похідними еліптичного типу з крайовими умовами I роду (задача Діріхле) [29]:

$$\begin{cases} \varepsilon \cdot \Delta u(x, y) - R^2(x, y) \cdot u = f(x, y, u); \\ \frac{u}{\partial \Omega} = 0. \end{cases}$$

В даному випадку  $\varepsilon$  – це малий параметр,  $\Delta$  – оператор Лапласа

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

$U(x, y)$  – це шукана функція,  $\pi$  – обмежена область з гладкою границею  $\partial \Omega$ .

Задача із даного прикладу не є лінійною. Тому що невідома функція  $U$  входить у вільний член  $f$  [7].

Якщо ж  $f$  не залежить від  $u$  задача матиме наступний вид:

$$\varepsilon \cdot \Delta U(x, y) - R^2(x, y) \cdot U = f(x, y)$$

Очевидно, що малий параметр тут знаходиться при похідних. Розв'язок даної не збуреної задачі буде мати вигляд [28]:

$$u_0(x) = \frac{f(x, y)}{-k^2(x, y)}$$

Можна побачити, що збурена задача (хоча нам ще не відомий її розв'язок) буде мати розв'язок на границі області рівняння 0, а відповідна їй не збурена задача на тій же границі області буде мати розв'язок, який може не дорівнювати нулю [28].

Отже, дана задача є сингулярно збуреною.

### 3.3. Асимптотичні методи у теорії диференціальних рівнянь.

#### Пограншарові поправки.

Диференціальні рівняння зі змінними коефіцієнтами, починаючи з другого порядку і вище, не можна розв'язувати в замкнутому вигляді.

Тому для розв'язування таких рівнянь зазвичай використовують різні методи наближення (асимптотичні методи, чисельні методи, інші якісні та аналітичні методи) [29].

Одним з таких методів є асимптотичний (метод малих параметрів).

**Визначення:** *Асимптотичний метод* – це метод, який дозволяє описати поведінку будь-якої функції або розв'язків інтегральних, диференціальних, інтер-диференціальних та інших видів рівнянь, у тих випадках, коли певні параметри, від яких залежать дані рівняння, прямують до нескінченної чи скінченної границі [29].

Асимптотичний метод виник із математичного аналізу у вісімнадцятому столітті. Він широко використовується в роботах Лагранжа і Лав'є, закладаючи міцну основу в теорії збурень [7].

З плином часу деякі задачі астрономії привели до появи нових методів Боллінга, Гільдена, Ньютона та інших.

Теорія диференціальних рівнянь включає асимптотику розв'язків за параметром чи за декількома параметрами, за незалежною змінною, за параметрами та незалежними змінними одночасно, а також такі випадки коли розв'язки при тій умові, що параметр чи незалежна змінна прямує до  $\infty$ , або ж до скінченної величини, мають асимптотичні поведження [13].

Параметр, який включається у диференціальне рівняння знаходиться при молодших або сталих похідних, може входити в рівняння регулярно чи сингулярно, може бути великим чи малим, входити в крайові або початкову умови [13].

Для того і є різні типи знаходження асимптотичних зображень розв'язків диференціальних рівнянь різного виду.

Нехай  $u_\varepsilon(x)$  визначений в певній області  $D$ , а також нехай  $D_1$  є під областю деякої області  $D$ .

$D_1$  визначена деяка функція  $u(x, \varepsilon)$ , зауважимо, що  $\varepsilon > 0$  [14].

Означення: якщо виконується умова:

$$\sup_{D_1} \|u_\varepsilon(x) - u(x, \varepsilon)\| \rightarrow 0, \varepsilon \rightarrow 0,$$

то функція  $u(x, \varepsilon)$  називається **асимптотичним наближенням по параметру  $\varepsilon$**  для розв'язку  $u_\varepsilon(x)$  підобласті  $D_1$  [14].

При цьому, якщо  $\sup_{D_1} \|u_\varepsilon(x) - u(x, \varepsilon)\| = O(\varepsilon^K)$ , то вважатимемо, що  $U(x, \varepsilon)$  є асимптотичним наближенням для  $u_\varepsilon(x)$  в області  $D_1$  з точністю порядку  $\varepsilon^K$  [15].

Даний запис  $\alpha(\varepsilon) = O(\varepsilon^K)$  означає, що існують такі числа  $C > 0$  та  $\varepsilon_0 > 0$  такі, що як тільки  $0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0$ ,  $\|\alpha(\varepsilon)\| \leq C \cdot \varepsilon^K$ .

Для ілюстративного зображення даного означення розберемо приклад 1,2 попереднього пункту. В першому прикладі функція  $u = u_0(x)$ , на всьому відрізку  $[0, 1]$ , є по суті асимптотичним наближенням для розв'язку  $u_\varepsilon(x)$  з точністю порядку  $\varepsilon$  [15].

В другому прикладі відповідно функція  $u = u_0(x)$  з точністю порядку  $\varepsilon$  не на всьому відрізку  $[0, 1]$  дає асимптотичне наближення для функції  $U_\varepsilon(x)$ , а лише на його частинці  $[\delta, 1]$ , тобто зовні пограншару.

Під асимптотичним методом для розв'язку  $u_\varepsilon(x)$  задачі  $A_\varepsilon$  вважають певний спосіб побудови асимптотичного наближення  $u(x, \varepsilon)$  [7].

Переважно побудова  $u(x, \varepsilon)$  зводиться до розв'язання дещо простіших задач, ніж задана вихідна задача  $A_\varepsilon$  [13].

Можливість знаходження ефективного розв'язку  $u(x, \varepsilon)$  з використанням більш простих задач і визначає практичну цінність асимптотичного методу [13].

**Приклад 1.** Розглянемо процес поширення забруднень у пористому середовищі (двозв'язній області) (рис. 3.2.) [29].

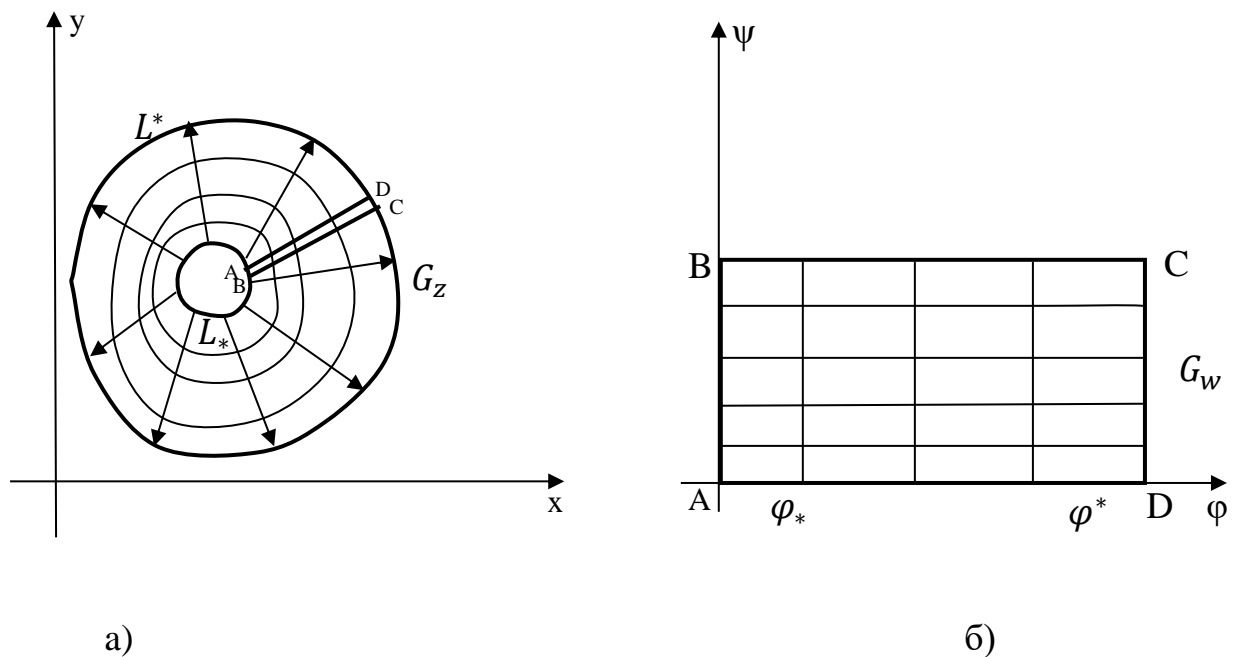


Рис. 3.2. Фізична область  $G_z$  (а) та відповідна їй область комплексного потенціалу  $G_w$  (б)

Даний процес змодельовано в область  $G_z$  так:

$$\varepsilon D \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - V_x \frac{\partial u}{\partial x} - V_y \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial u}{\partial t}$$

$$u|_{t=0} = u_0^0(x, y); u|_{L_*=0} = u_*(P, t); u|_{L^*=0} = u^*(P, t),$$

де  $P$  – біжуча точка відповідної кривої.

Здійснивши конформне відображення області  $G_z$  в область комплексного потенціалу  $G_w$  отримаємо наступну задачу, перейшовши від змінних  $x, y$  до змінних  $\varphi, \psi$  [7]:

$$\varepsilon D v^2(\varphi, \psi) \left( \frac{\partial^2 c}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial \psi^2} \right) - v^2(\varphi, \psi) \frac{\partial c}{\partial \varphi} = \frac{\partial c}{\partial t}$$

$$C|_{t=0} = C_0^0(\varphi, \psi); C|_{\varphi_*=0} = C_*(\varphi, \psi); C|_{\varphi^*=0} = C^*(\varphi, \psi).$$

Розв'язок даної задачі з точністю  $O(\varepsilon^2)$  будемо шукати у вигляді асимптотичного ряду:

$$C(\varphi, \psi, t) = C_0(\varphi, \psi, t) + \varepsilon C_1(\varphi, \psi, t) + \Pi_0(\mu, \psi, t) + \varepsilon \Pi_1(\mu, \psi, t) + \\ + \varepsilon^2 \Pi_2(\mu, \psi, t) + R_2(\varphi, \psi, t, \mu, \varepsilon).$$

Підставимо наш ряд в записану вище задачу.

*Зауважимо*, оскільки в розглянутому випадку похідна суми дорівнює сумі похідних, то підставляємо спочатку частину ряду, яка є регулярною складовою процесу, а потім підставимо частину ряду, що є погран шаром [8]:

$$\varepsilon D v^2(\varphi, \psi) (C_{0\varphi\varphi} + \varepsilon C_{1\varphi\varphi} + C_{0\psi\psi} + \varepsilon C_{1\psi\psi}) - v^2(\varphi, \psi) (C_{0\varphi} + \varepsilon C_{1\varphi}) = \\ = C_{0t} + \varepsilon C_{1t}.$$

Прирівняємо коефіцієнти при однакових степенях

$$\varepsilon^0: \begin{cases} v^2(\varphi, \psi) C_{0\varphi} + C_{0t} = 0; \\ C|_{t=0} = C_0^0(\varphi, \psi); \\ C|_{\varphi_*=0} = C_*(\varphi, \psi). \end{cases}$$

$$\varepsilon^1: \begin{cases} v^2(\varphi, \psi) C_{1\varphi} + C_{1t} = g(\varphi, \psi, t); \\ C|_{t=0} = 0; \\ C|_{\varphi_*=0} = 0. \end{cases}$$



Розв'яжемо першу задачу для знаходження  $C_0$ . Складемо відповідну систему диференціальних рівнянь у симетричній формі [28]:

$$\frac{d\varphi}{v^2(\varphi, \psi)} = \frac{dt}{1}$$

$$\int_{\varphi_*}^{\varphi} \frac{d\varphi}{v^2(\varphi, \psi)} = \int_0^t dt.$$

Нехай інтеграл у лівій частині ми знайшли. Результат позначим через  $f(\varphi, \psi)$ . Це буде відома нам якась функція [28].

$$f(\varphi, \psi) - t = k_1$$

$$t=0: \widetilde{k}_1 = f(\varphi, \psi)$$

$$\varphi = f^{-1}(\widetilde{k}_1, \psi)$$

Тоді підставимо у початкову умову:

$$C_0(\varphi, \psi) = C_0^0(f^{-1}(f(\varphi, \psi) - t), \psi),$$

$$t \leq f(\varphi, \psi)$$

$$\varphi = \varphi_*$$

$$\widetilde{k}_1 = -t \Rightarrow t = -\widetilde{k}_1$$

$$C_0(\varphi, \psi) = C_*(\psi, -\widetilde{k}_1) = C_*(\psi, t - f(\varphi, \psi)),$$

$$t \geq f(\varphi, \psi)$$

Тоді

$$C_0(\varphi, \psi, t) = \begin{cases} C_0^0(f^{-1}(f(\varphi, \psi) - t), \psi), & t < f(\varphi, \psi), \\ C_*(\varphi, t - f(\varphi, \psi)), & t \geq f(\varphi, \psi), \end{cases}$$

1) Розв'яжемо другу задачу. Складемо відповідну систему диференціальних рівнянь у симетричній формі [7]:

$$\frac{d\varphi}{v^2(\varphi, \psi)} = \frac{dt}{1} = \frac{dc_1}{g(\varphi, \psi, t)}$$

$$k_1 = f(\varphi, \psi) - t,$$

$$dc_1 = g(\varphi, \psi, t) dt$$

$$f(\varphi, \psi) = k_1 + t$$

$$\varphi = f^{-1}(k_1 + t, \psi)$$

$$dc_1 = g(f^{-1}(k_1 + t, \psi), \psi, \tilde{t})d\tilde{t}$$

$$c_1 = \int_0^t g(f^{-1}(k_1 + t, \psi), \psi, \tilde{t})d\tilde{t} + k_2$$

$$k_2 = c_1 - \int_0^t g(f^{-1}(k_1 + t, \psi), \psi, \tilde{t})d\tilde{t}$$

$$\begin{cases} \widetilde{k}_1 = f(\varphi, \psi); \\ \widetilde{k}_2 = c_1, \end{cases}$$

$$\begin{cases} c_1 = \widetilde{k}_2; \\ \varphi = f^{-1}(\widetilde{k}_1, \psi). \end{cases}$$

$$k_2 = 0$$

$$c_1 - \int_0^t g(f^{-1}(f(\varphi, \psi) - t + \tilde{t}, \psi), \psi, \tilde{t})d\tilde{t} = 0$$

$$C_1(\varphi, \psi, t) = \int_0^t g(f^{-1}(f(\varphi, \psi) - t + \tilde{t}, \psi), \psi, \tilde{t})d\tilde{t}, \quad t \leq f(\varphi, \psi).$$

$$dc_1 = \frac{g(\varphi, \psi, t)}{v^2(\varphi, \psi)}d\varphi, \quad t \leq f(\varphi, \psi) - k_1$$

$$dc_1 = \frac{g(\tilde{\varphi}, \psi, f(\tilde{\varphi}, \psi) - k_1)}{v^2(\tilde{\varphi}, \psi)}d\tilde{\varphi}$$

$$c_1 = \int_{\varphi_*}^{\varphi} \frac{g(\tilde{\varphi}, \psi, f(\tilde{\varphi}, \psi) - k_1)}{v^2(\tilde{\varphi}, \psi)}d\tilde{\varphi} + k_2.$$

$$\begin{cases} \widetilde{k}_1 = -t; \\ \widetilde{k}_2 = c_1, \end{cases}$$

$$\begin{cases} c_1 = \widetilde{k}_2; \\ t = -\widetilde{k}_1. \end{cases}$$

$$k_2 = 0$$

$$c_1 - \int_{\varphi_*}^{\varphi} \frac{g(\tilde{\varphi}, \psi, f(\tilde{\varphi}, \psi) + t - f(\varphi, \psi))}{v^2(\tilde{\varphi}, \psi)}d\tilde{\varphi} = 0.$$

$$C_1(\varphi, \psi, t) = \int_{\varphi_*}^{\varphi} \frac{g(\tilde{\varphi}, \psi, f(\tilde{\varphi}, \psi) + t - f(\varphi, \psi))}{v^2(\tilde{\varphi}, \psi)}d\tilde{\varphi}, \quad t > f(\varphi, \psi).$$

Звідси

$$C_1(\varphi, \psi, t) = \begin{cases} \int_0^t g(f^{-1}(f(\varphi, \psi) - t + \tilde{t}, \psi), \psi, \tilde{t}) d\tilde{t}, & t \leq f(\varphi, \psi), \\ \int_{\varphi^*}^{\varphi} \frac{g(\tilde{\varphi}, \psi, f(\tilde{\varphi}, \psi) + t - f(\varphi, \psi))}{v^2(\tilde{\varphi}, \psi)} d\tilde{\varphi}, & t > f(\varphi, \psi). \end{cases}$$

Знайдемо пограншар.

$$\mu = \frac{(\varphi^* - \varphi)}{\varepsilon} \Rightarrow \varphi = \varphi^* - \varepsilon\mu.$$

Тоді

$$\begin{aligned} v^2(\varphi, \psi) &= v^2(\varphi^* - \varepsilon\mu, \psi) = \\ &= v^2(\varphi^*, \psi) + 2v(\varphi^*, \psi)(-\varepsilon\mu) + v'(\varphi^*, \psi)^2 + v''(\varphi^*, \psi) \cdot v(\varphi^*, \psi))\mu^2 \end{aligned}$$

Підставимо ряд для  $v^2$  і  $P_i$  у наше рівняння та умови, прирівнявши коефіцієнти при однакових степенях  $\varepsilon$ , попередньо перейшовши до

$$\mu \left( \frac{\partial P}{\partial \varphi} = \frac{\partial r}{\partial \mu} \cdot \frac{\partial \mu}{\partial \varphi} = \frac{1}{\varepsilon} \cdot \frac{\partial P}{\partial \mu} \right), \frac{\partial^2 r}{\partial \varphi^2} = \frac{1}{\varepsilon^2} \cdot \frac{\partial^2 P}{\partial \mu^2}.$$

$$\varepsilon^{-1} \cdot \begin{cases} D\Pi_{0\mu\mu} + \Pi_{0\mu} = 0 \\ \Pi_0(\mathbf{0}, \psi, t) = C^*(\psi, t) - C_0(\varphi^*, \psi, t); \Pi_0 \rightarrow 0, \quad \mu \rightarrow \infty. \end{cases}$$

$D\Pi_0'' + \Pi_0' = 0$  – знайдемо розв'язок даного рівняння. Для цього спочатку складемо і розв'яжемо характеристичне рівняння:  $Dk^2 + k = 0 \rightarrow k(Dk + 1) = 0$ , тоді  $k_1 = 0, k_2 = -\frac{1}{D}$ .

Отже,  $\Pi_0 = C_1 \cdot e^{0\mu} + C_2 \cdot e^{-\frac{\mu}{D}} = C_1 + C_2 \cdot e^{-\frac{\mu}{D}}$ . Знайдемо звідси  $C_1$  і  $C_2$ :  $0 = C_1$ . Тоді  $\Pi_0 = C_2 \cdot e^{-\frac{\mu}{D}}$ . Тоді,  $C^*(\psi, t) - C_0(\varphi^*, \psi, t) = C_2 \cdot e^{-0} = C_2$ .

Отже,  $\Pi_0(\mu, \psi, t) = (C^*(\psi, t) - C_0(\varphi^*, \psi, t)) \cdot e^{-\frac{\mu}{D}}$ .

### 3.4. Комп'ютерне моделювання процесу біологічної очистки підземних вод від сполук важких металів на біореакторі за допомогою пакету MathCAD

Для того щоб спростити розрахунки та зменшити час при проведенні досліджень із розв'язуванням математичних моделей за допомогою комп'ютера можна використовувати програми написані алгоритмічними

мовами високого рівня, таких як *C++*, *C#*, *Паскаль* та ін. або пакети прикладних математичних програм, такі як *Math Lab*, *Maple*, *MathCAD*, *Derive*, *Mathlab*. Ці системи та інші програмні пакети відображають розроблені методи аналізу та апроксимації [26]. Іншими словами, вони систематизують і реалізують усі математичні методи розв'язування аналітичних та числових диференціальних, інтегральних та інших рівнянь.

Використання СКМ (систем комп'ютерного моделювання) дозволяє швидко проаналізувати розв'язок математичної моделі та відтворити закономірність досліджуваного процесу [35].

Використання ПМП (пакетів математичних програм) може скоротити час, необхідний для розв'язування математичної моделі. Основним недоліком є дещо обмежені у функціоналі методи для розв'язування складних систем інтегральних та диференціальних рівнянь, а також систем лінійних ДРЧП (в СКМ закладені спеціальні процедури) [35].

Розглянемо процес комп'ютерного моделювання із використанням пакету *MathCAD*, у якого дуже великий функціонал, наприклад [35]:

- усі рівняння та формули записані в програмі *MathCAD* у звичайній математичній формі. Решта комп'ютерних математичних пакетів використовують складний для загального сприйняття та запам'ятовування синтаксис;
- зовнішній вигляд редагування та, власне кажучи, запису прикладів дуже схожий на роботу з пакетом *Word*;
- у програмі міститься інструктований потужний зручний математичний інструмент, який дає змогу подавати розв'язання задачі в аналітичному та числовому виді;
- програма має зручні функції графічного представлення інформації;

Прикладне програмне забезпечення *MathCAD* містить такі функціональні переваги [35]:

- обчислювальну систему, яка використовується математичних обрахунків як в символному, так і в чисельному виді;
- редактор графіків;
- редактор формул;
- текстовий редактор, який використовується для запису коментарів до обчислень;
- масштабний набір панелей інструментів;
- ієрархічну систему меню;

Використовуючи результати досліджень Квартенка О. М. та Присяжнюка І. М., напишемо програму в програмному середовищі MathCAD для комп'ютерної реалізації моделі та реалізації подальших розрахунків. Під час побудови комп'ютерної моделі беруться до уваги зміни кількості структур біомінералів, бактерій, двовалентного металу  $Fe^{2+}$ , які є підґрунтям для подальшого можливого передбачення часу роботи між промивками завантаження біологічного реактора [18].

Числові розрахунки виконано при  $V = 10$  м/год,  $B^{**} = 9,5$  г/м<sup>3</sup>,  $\mu_{max} = 0,17$  год<sup>-1</sup>,  $K_F = 0,7$  г/м<sup>3</sup>,  $\lambda = 10^{-6}$  год<sup>-1</sup>,  $F_0^0(x_0) = 1,6$  г/м<sup>3</sup>,  $F^*(t) = 1,6$  г/м<sup>3</sup>,  $B_0^0(x_0) = 0,001$  г/м<sup>3</sup>,  $B^*(t) = 0,001$  г/м<sup>3</sup>,  $\beta_1 = \beta_2 = 279$ ,  $\eta_1 = \eta_2 = 530$ ,  $K_1 = 0,78$  год<sup>-1</sup>,  $K_2 = 0,1$  год<sup>-1</sup>,  $K_3 = 0,9$  год<sup>-1</sup>,  $U_0^0(x_0) = 0,1$  г/м<sup>3</sup>,  $S^*(t) = 0$  г/м<sup>3</sup>,  $S_0^0(x) = 0$  г/м<sup>3</sup>,  $M_0^0(x) = 10$  г/м<sup>3</sup>,  $\gamma = 0,66$  год<sup>-1</sup>,  $M_*^* = 2,65$  кг/м<sup>3</sup> [12].

На рис. 3.1 зображені результати експериментальних та теоретичних досліджень розподілу: *a* – іонів двовалентного металу  $Fe^{2+}$ ; *b* – залізобактерій; *в*, *г* – структур матриксу в міжпоровому просторі реактора. Також показано розподіл кількості динамічних матриксних структур на різних часових проміжках після промивання (рис. 3.2) по глибині завантаження біологічного реактора, при середній швидкості 10 м/год [16].

Підбиваючи підсумки (рис. 3.1), бачимо, що з послідовним накопиченням статичних бактерій у верхніх шарах завантаження біологічного реактора посилюється окиснення сполук Феруму  $Fe$  з майбутнім утворенням матриксів. Отож, амплітуда кількості іонів двовалентних металів залежна від популяції феробактерій [27]. Для прикладу, внизу завантаження реактора, що складає висоту 0,2 м, можна помітити плавне збільшення популяції бактерій, та одночасно зменшення кількості йонів двовалентного Ферум, а також нагромадження структур матриксів.

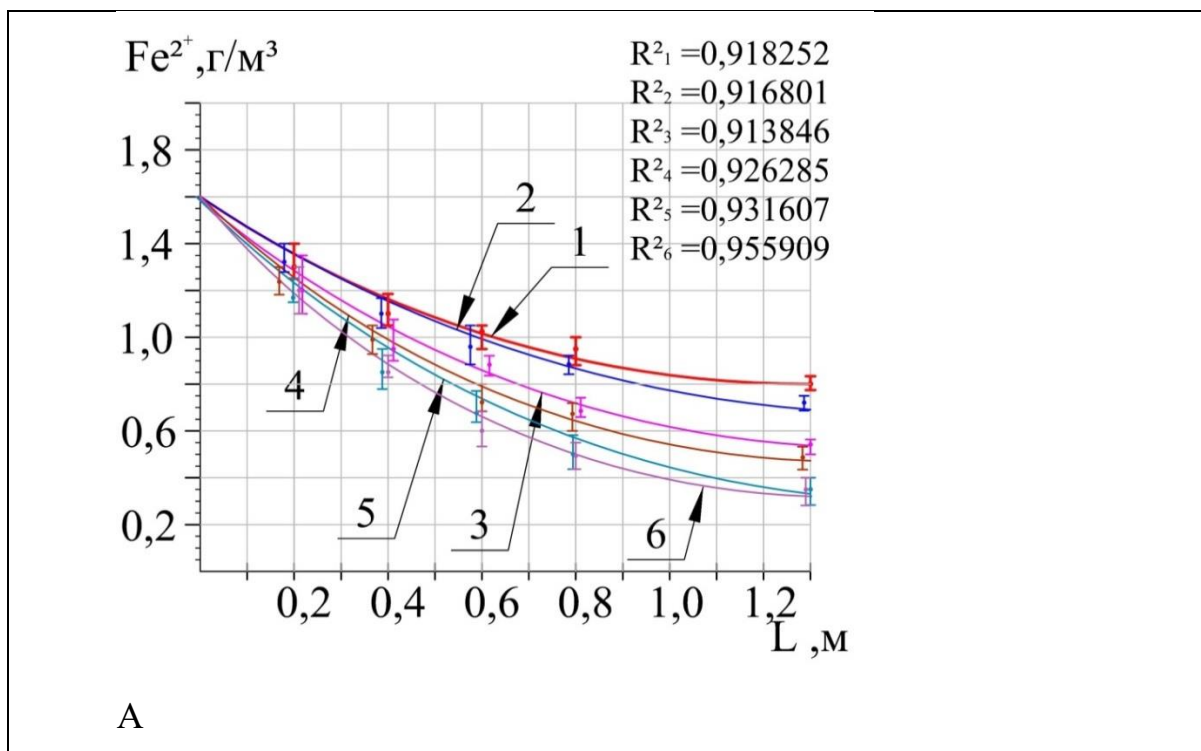
На глибині 0,2-0,4 м спостерігається найвища популяція феробактерій *Gallionella*, що кріпляться на структурах матриксів. Це значить, що в даний період часу посилюються процеси окиснення сполук двовалентних металів та утворюється «статичні» матриксні структури [20].

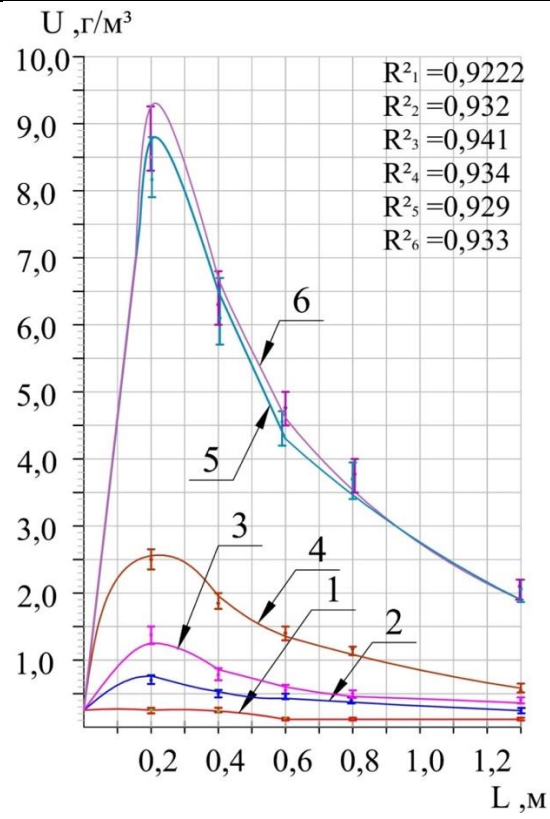
Покроково, залежно від глибини завантаження біореактора, можна побачити плавне зменшення популяції активних залізобактерій. Даний факт можна пояснити зниженням кількості іонів Феруму, які є основною складовою дихального ланцюга феробактерій, забезпечують його електронами та зменшують концентрацію розчиненого вуглецю та кисню, без яких не можлива побудова біомаси клітин.

В результаті, на глибині від 0,8 до 1,3 м відбувається поступове сповіднення біологічних процесів окиснення іонів двовалентних металів  $Fe^{2+}$  із виходом на плато (рис. 3.1 а) [33].

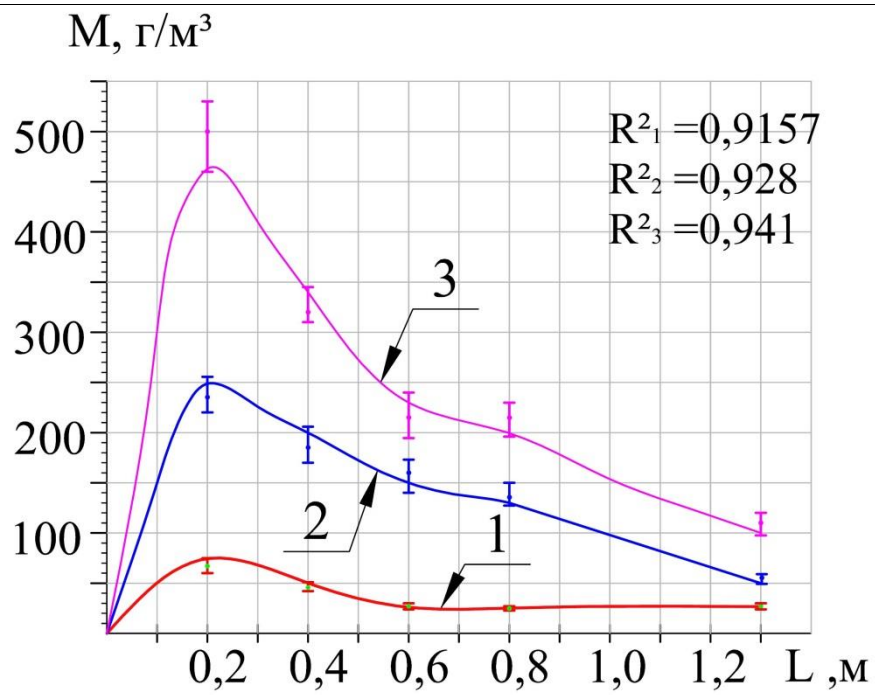
На таких глибинах завантаження реактора спостерігається, що в порівнянні із верхніми шарами, популяція активних бактерій знижується в декілька разів (рис. 3.1 б). Одночасно відбувається поступове заповнення міжпорового простору біореактора структурами матриксу на протязі усієї роботи реактора. На рис. 3.1 в можна побачити збільшення кількості структур матриксу в міжпоровому просторі реактора на кожній із заданих ділянок, що досліджуються [20].

Ще варто звернути увагу на вплив у час перед промивками, направлений на роботу біологічного реактора динамічними матриксними структурами (рис. 3.2). Найбільше це явище спостерігається під час його поступового руху по глибини завантаження біологічного реактора. Найвища кількість рухомої частини структур матриксів зосереджена на глибині 0,4 м, де ч=цифра «статичних» матриксних структур майже рівна максимальній брудомісткості реактора (рис. 3.1 в), як наслідок, відбувається відрив та перенесення структур матриксу до нижніх шарів установки [20].





Б



Б



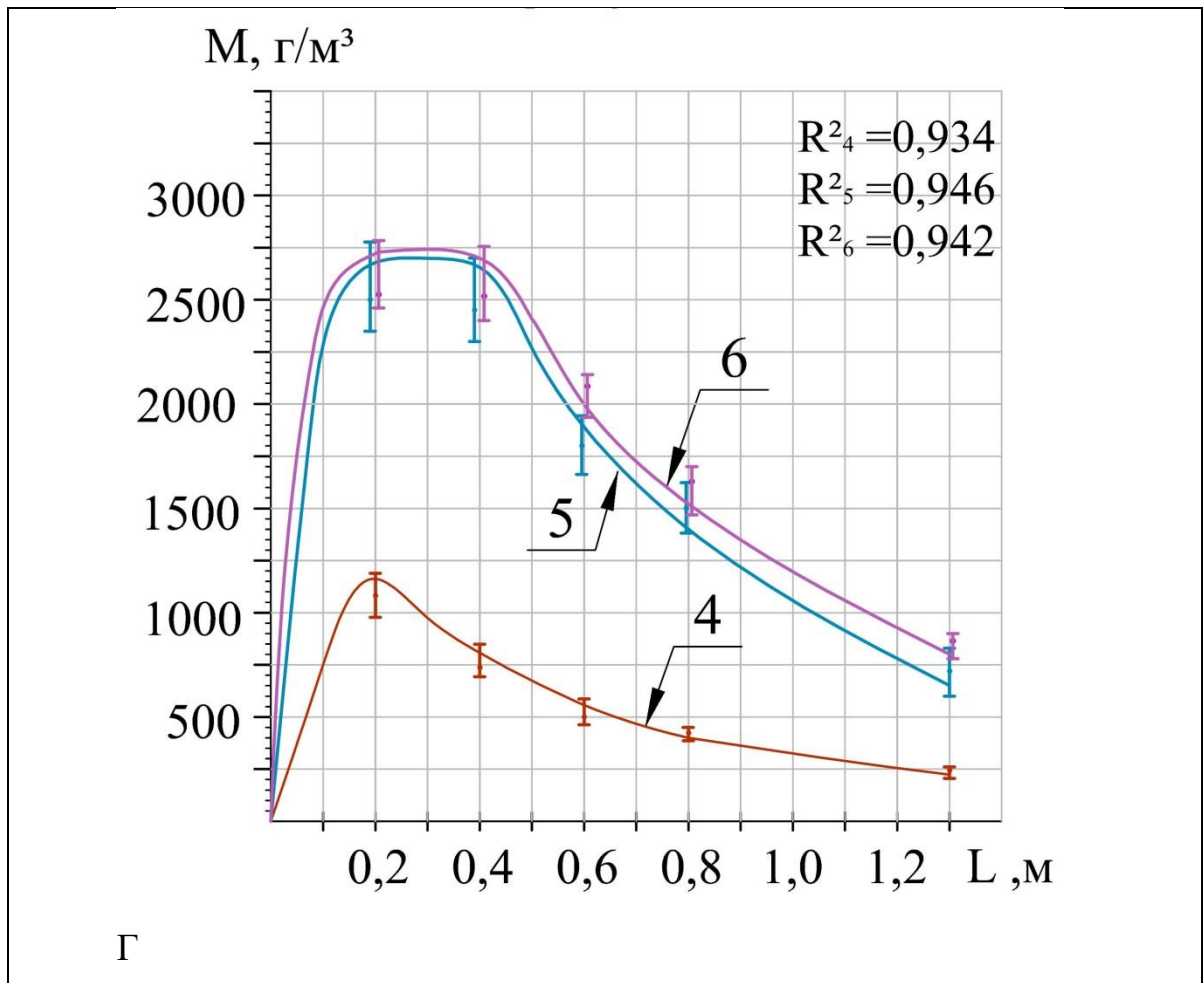


Рис. 3.1. Розподіл результатів теоретичних та експериментальних досліджень отриманих під час роботи біологічного реактора по глибині контактного завантаження між промивками шуканих компонентів: *a* – концентрацій двовалентного заліза  $Fe^{2+}$ : від 1 до 4 годин; від 2 до 16 годин; від 3 до 24 години; від 4 до 48 годин; від 5 до 143 години; від 6 до 150 годин; *б* – залізобактерій: від 1 до 4 годин; від 2 до 16 годин; від 3 до 24 години; від 4 до 48 годин; від 5 до 143 години; від 6 до 150 годин; *в, з* – матричних структур в міжпоровому просторі: від 1 до 4 годин; від 2 до 16 годин; від 3 до 24 години; від 3 до 24 години; від 4 до 48 годин; від 5 до 143 години; від 6 до 150 годин [20].

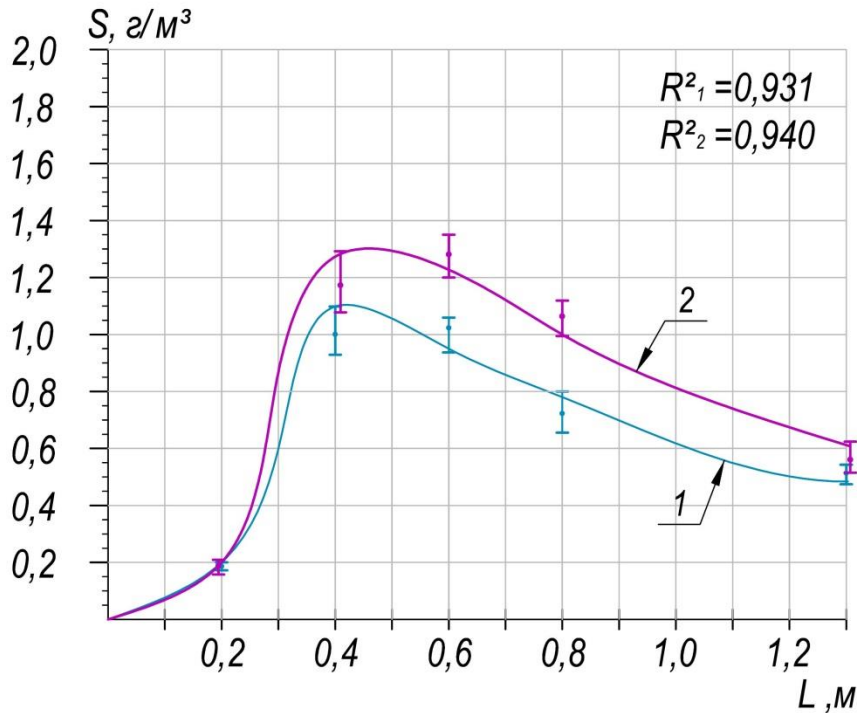


Рис. 3.2. Розподіл протягом часу роботи реактора рухомих структур матриксу по глибині його контактної завантаження: 1 – це 143 години; 2 – це 150 годин [20].

Відзначимо, що для того аби збільшити величину глибини накопичення структур матриксу до понад 60-80 см, треба використовувати застосовувати пінопласт більших гранул [18].

Комп'ютерна реалізація математичної моделі дає змогу проаналізувати та спрогнозувати те як змінюється ефективність очищення, маса рухомих та статичних матриксів, значення величини біомаси по глибині завантаження реактора з плином часу. Така модель також дає змогу спрогнозувати, що найефективніший час між промивками біологічного реактора становить 9 днів. В свою чергу, найвигідніша висота завантаження біореактора становить 1,2 м, а на його верхні шари (близько 0,2 – 0,6 м) припадає основне навантаження [33].

## ВИСНОВКИ

У даній роботі увага приділяється математичному моделюванню сингулярно збурених процесів очищення підземних вод від сполук металів на біологічному реакторі.

Основні результати роботи:

- ✓ проведено дослідження рівня забруднення прісних вод в Україні та світі і розглянути наслідки від споживання такої води;
- ✓ дано означення поняття водопідготовки та проаналізувати основні методи очистки підземних вод;
- ✓ проаналізовано сингулярно збурену математичну модель процесів очищення підземних вод на біологічному реакторі;
- ✓ описано методичні рекомендації та підібрати матеріали, що допоможуть обдарованим учням при вивченні задач прикладного характеру;
- ✓ представлено приклад комп'ютерного моделювання процесів очистки підземних вод від сполук металів та аналізу результатів, отриманих при розв'язанні даної моделі в середовищі MathCAD.

Матеріали магістерської роботи можуть бути використані у роботі викладачів та студентів при вивченні курсу «Математичне моделювання». Також робота може бути використана вчителями, що викладають у старших класах та працюють із обдарованими учнями у гуртках та проектах МАН.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Закон України Про питну воду, питне водопостачання та водовідведення *{Назва Закону в редакції Закону N 2047-VIII (2047-19) від 18.05.2017}*.
2. Про затвердження Державних санітарних правил і норм «Вода питна. Гігієнічні вимоги до якості води централізованого господарсько-питного водопостачання» *{Із змінами, внесеними згідно з Наказом Міністерства охорони здоров'я N 400 (з0452-10) від 12.05.2010}*.
3. Алексеев В. С., Коммунар Г. М., Янбулатова Ф. Х. Моделирование процессов окисления железа в водоносных пластах. *Методы расчета процессов массопереноса в гидрогеологических исследованиях*. Москва, 1984. С. 10–13.
4. Бомба А. Я., Барановський С. В., Присяжнюк І. М. Нелінійні сингулярно-збурені задачі типу «конвекція – дифузія». Рівне: НУВГП, 2008. 254 с.
5. Бомба А.Я. Нелінійні сингулярно збурені задачі типу «конвекція-дифузія»/ А. Я. Бомба, С.В. Барановський, І.М. Присяжнюк – Рівне: НУВГП, 2008. – 254 с.
6. Бомба А.Я. Об асимптотическом методе приближенного решения одной задачи массопереноса при фильтрации в пористой среде / А.Я. Бомба // Укр. матем. журн. – 1982. с. 493-496.
7. Васильева А. Б. Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений / А. Б. Васильева, В.Ф. Бутузов -М.: Наука, 1993.-273 с.
8. Вишик М.И., Люстерник Л.Я. Регулярное вырождение и пограничный слой для линейных дифференциальных уравнений с малым параметром // Успехи математических наук.- 1957.- 12, Вып. 5. - С. 3-122.
9. Водопідготовка. Wikipedia: веб сайт. URL: <https://uk.wikipedia.org/wiki/Водопідготовка> (дата звернення: 23.11.2020).

10. Дослідження контактного знезалізнення на пінополістирольних фільтрах / В. О. Орлов, С. Ю. Мартинов, С. О. Куницький, М. М. Меддур. *Вісник ОДАБА*, 2013. Вип. 50. Ч. 2. С. 132–136.
11. Дудник С. В., Євтушенко М. Ю. Водна токсикологія: основні теоретичні положення та їхнє практичне застосування: монографія. Київ: Вид-во Українського фітосоціологічного центру, 2013. 297 с.
12. Журба М. Г., Говорова Ж.М. Водоснабжение. Улучшение качества воды: учебник для вузов. Том 2. Москва: Издательство АСВ, 2008. 544 с.
13. Исакова Е.К. Асимптотика решения дифференциального уравнения в частных производных второго порядка параболического вида с малым параметром при производной // ДАН СССР.- Т.117, №6.- 1957.- С. 935-938.
14. Исакова Е.К. Асимптотическое разложение решения параболического уравнения с малым параметром // Матем. сборник.- 1966.- Т.69(111). С. 300-320.
15. Каменомостская С. Л. Об уравнениях эллиптического и параболического типа с малым параметром при старших производных // Матем. сб.- 1952.- Т.31(73).- С. 703-708.
16. Квартенко О. М. Використання біохімічного методу в сучасних технологіях водоочищення підземних вод (огляд). *Вода і водоочисні технології. Науково-технічні вісті*. 2016. №2(19). С. 51 – 65.
17. Квартенко О. М. Прогнозування процесу біологічного знезалізнення підземних вод на біореакторі. *EASTERN-EUROPEAN JOURNAL OF ENTERPRISE TECHNOLOGIES*. 2019, № 10 (101), С. 14-22
18. Квартенко О., Присяжнюк І. Моделювання кінетики процесу видалення сполук заліза в біореакторі. *Технічні науки та технології: науковий журнал*. Чернігів: ЧНТУ, 2017. №4 (10). С. 247-254.
19. Квартенко О.М. Системний підхід до обґрунтування нових та удосконалення існуючих технологій кондиціонування багатокomпонентних підземних вод. *Комунальне господарство міст*. Серія: Технічні науки та

архітектура, 2018. Харків: Харківський національний університет ім. О. М. Бекетова. Вип. 140. С. 98 -103.

20. Квартенко, О. М. Розвиток наукових засад удосконалення технологій очищення багатокомпонентних підземних вод : дис. ... д-ра техн. наук. : 05.17.21 – технологія водоочищення / Квартенко Олександр Миколайович. Київ, 2019. 429 с.

21. Математичне моделювання. Wikipedia: веб сайт. URL: [https://uk.wikipedia.org/wiki/Математичне\\_моделювання](https://uk.wikipedia.org/wiki/Математичне_моделювання) (дата звернення: 12.07.2021).

22. Маценко В. Г. Математичне моделювання: навчальний посібник. Чернівці: Чернівецький національний університет, 2014. 519 с.

23. Михайленко О. М. Диференціальні рівняння» для підготовки учнів 11 класу під час гурткової роботи при Малій Академії Наук: веб сайт. URL: [https://www.google.com/FILE\\_DOWNLOAD\\_2015\\_124\\_27.pdf](https://www.google.com/FILE_DOWNLOAD_2015_124_27.pdf) (дата звернення: 15.05.2021).

24. Олійник О. Я., Садчиков О. О. Теоретичні дослідження знезалізнення води на двошарових фільтрах. Пробл. водопостачання, водовідведення та гідравліки. Київ: КНУБА, 2013. Вип. 21. С. 14–22.

25. Петровский И.Г. Лекции по теории обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1984. - 320 с.

26. Пилипенко А. Т., Вахнин И. Г., Максин В. И. //Химия и технология воды. 1991. 13, № 8. С. 693-727.

27. Поляков В. Л., Мартинов С. Ю. До теорії фізико-хімічного знезалізнення підземних вод та її інформаційного забезпечення. Чиста вода. Фундаментальні, практичні та промислові аспекти. Матеріали V Міжнародної науково-практичної конференції. Київ, 2017 - С. 178- 181.

28. Присяжнюк І.М. Асимптотичний метод розв’язування сингулярно збурених крайових задач типу “конвекція-дифузія” у многозв’язних областях //

Волинський математичний вісник. Серія прикладна математика. 2003. Вип. 1. С. 118–128.

29. Присяжнюк І.М., Присяжнюк О.М. Асимптотичний метод розв'язування одного класу сингулярно збурених крайових задач типу “конвекція-дифузія-масообмін” у двозв'язних областях// Вісник ТДТУ.Т.10, №4. 2005. С. 198–205.

30. Сівак В.М., Бомба А.Я., Присяжнюк І.М., Комп'ютерне моделювання процесів очищення стічної води на каркасно-засипних фільтрах. *Вісник НУВГП*. Збірник наукових праць. Вип. 4 (32). Рівне: НУВГП, 2005. С. 164-169.

31. Технологія знезалізнення води для питних потре / Орлов В. О., Мартинов С. Ю., Куницький С. О., Меддур М. М. Рівне: НУВГП, 2013. URL: <https://eprints.kname.edu.ua/32156/1/7.pdf> (дата звернення: 08.10.2021).

32. Чуб І. М. Мікробіологія і хімія води: конспект. Харків: ХНУМГ ім. О. М. Бекетова, 2019. 122 с.

33. Alexander Kvartenko, Igor Prysiazhniuk Prediction of the process of biological deferrization of underground water in a bioreactor. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, 2019, № 10 (101), P. 14-22 DOI: 10.15587/1729-4061.2019.177537.

34. Bomba A. Mathematical Modeling of Wastewater Treatment From Multicomponent Pollution by Using Microporous Particles / A. Bomba, Yu. Klymiuk, I. Prysiazhniuk, O. Prysiazhniuk, A. Safonyk // *AIP Conf. Proc.* 2016 1773, 040003 (2016). P. 1–11.

35. Computer Simulations in Science. *Stanford Encyclopedia of Philosophy*: веб-сайт. URL: <https://plato.stanford.edu/entries/simulations-science/> (дата звернення: 01.07.2021).

36. Kvartenko O. Model of Biomineralization of Ferrum Compounds by Gallionella Cells Immobilized on Contact Loading of Bioreactor / O. Kvartenko, I. Gryuk, L. Sabliy. // *JEECS*. 2017. №3 (2). С. 51–56.

37. Mouchet, P., 1992. From conventional to biological removal of iron and manganese. *J. Am. Water Works Assoc.* 84 (4), C. 158 – 167.
38. Sharma, S.K., Petrusevski B., Schippers, J.C., 2005. Biological iron removal from groundwater: a review. *J. Water Supply Res. Technol. AQUA* 54, C. 239 – 247.
39. VanDijkJ. C, Munnweke B. R., Kramer B., Wouters J. W.II *Desalination.* 1991. 81, N 1-3. P. 229-247.