

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ДЕНІТРИФІКАЦІЇ ПИТНОЇ ВОДИ

Сєдих О. Л., Чобану В. В.

Національний університет харчових технологій, Київ, Україна

olgased@ukr.net

In this work, a model of the process of denitrification of drinking water, which is used when creating a software module to be used in the system «Control of the quality of clean water in contaminated territories».

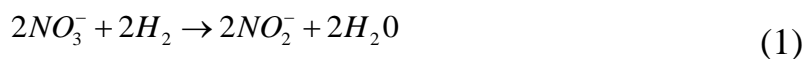
Забезпечення населення якісною питною водою є одним з головних державних завдань, яке набуло особливої актуальності у зв'язку з погіршенням загальної екологічної обстановки і надмірним забрудненням водних об'єктів і джерел водопостачання.

Багато джерел питної води, особливо в районах інтенсивного сільського господарства, містять дуже високий рівень нітрат іонів, вище безпечного рівня. Концентрація нітратів у питній воді лімітується міжнародними і вітчизняними стандартами до 45–50 мг NO₃ в 1 дм³[1]. Відомо, що нітрати у підвищеній концентрації в питній воді згубно впливають на організм людини, а у дітей легко відновлюються до нітритів, які взаємодіють з гемоглобіном крові, спричиняючи утворення метгемоглобіну, що призводить до хвороби крові. У всьому світі суттєво зростає забруднення природних вод нітратами, що змушує закривати криниці та використовувати дорогі багатоступеневі методи очищення питної води. Україна не є винятком у цьому відношенні, і у нас також спостерігається неухильне щорічне збільшення кількості понаднормово забруднених нітратами джерел питної води, так в криницях багатьох областей України цей рівень сягає 950 мг NO₃⁻ в 1 дм³.

Відомі деякі речовини, які перетворюють нітрат іони в нітрит іони, а потім у азот, використовуючи водень, як електрон-донор в реакції. Цей процес називається денітрифікацією, що здійснює відновлення нітратів до вільного азоту.

Процес денітрифікації викликається цілим рядом мало специфічних мікроорганізмів. Процес цей окислювально-відновний. Денітрифікуючі бактерії є факультативними анаеробами. В умовах широкого доступу кисню вони не виконують процес денітрифікації. Варто їм потрапити в анаеробні умови, щоб при наявності нітратів почався процес денітрифікації. При нестачі кисню вони його починають забирати від нітратів, відновлюючи їх.

Рівняння денітрифікації можна представити у наступному вигляді:



Перевага цього процесу - це додавання тільки водню до процесу.
Кінетика кожної реакції має вигляд:

$$r_1 = V_{\max 1} \frac{C_{NO_3}}{(C_{NO_3} + K_{NO_3})} \cdot \frac{C_{H_2}}{(C_{H_2} + K_{H_2})} \quad (3)$$

$$r_2 = V_{\max 2} \frac{C_{NO_2}}{(C_{NO_2} + K_{NO_2})} \cdot \frac{C_{H_2}}{(C_{H_2} + K_{H_2})} \quad (4)$$

де V_{\max} – максимальна швидкість кожної реакції.

Для очистки води, через денітрифікацію, доцільно використовувати систему, що містить частинки піску з архітектурою наведеною на рисунку 1. Водень абсорбуються у реакторі і в абсорбційному бункері, які пов'язані одним циклом, що постачає надходження водню у реактор. Це дає можливість регулювати різницю в концентрації водню, оскільки концентрація безпосередньо залежить від швидкості реакції. Додавання рециркулю полегшує регулювання рН і температури потоку рециркулю і, отже, реактора.

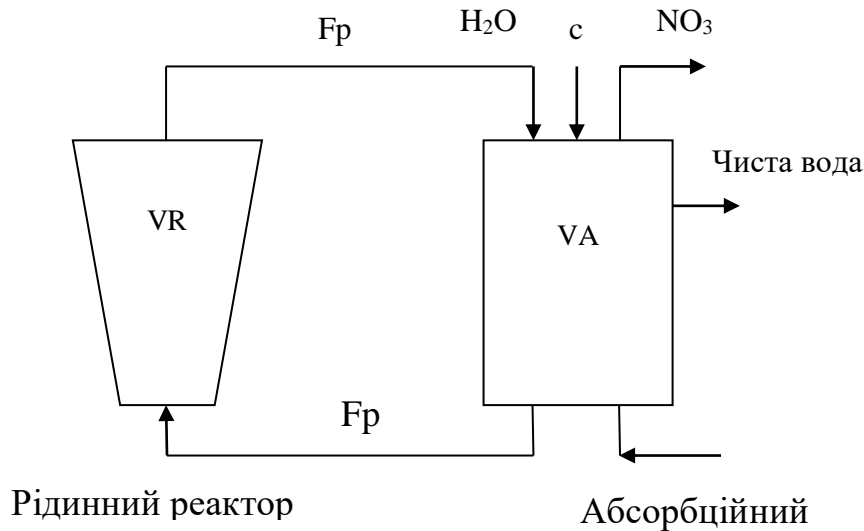


Рис. 1. Схема реактора

Рідинній реактор і абсорбційний бункер моделюються на основі моделі ідеального перемішування. Рівняння матеріального балансу по нітрату наведено у формулі (5), по нітриту – у формулі (6), по водню - формулі (7).

$$(V_A + V_R) \frac{dC_{NO_3}}{dt} = F(C_{NO_{3in}} - C_{NO_3}) - r_1 V_R \quad (5)$$

$$(V_A + V_R) \frac{dC_{NO_2}}{dt} = F(C_{NO_{2in}} - C_{NO_2}) - r_2 V_R + r_1 V_R \quad (6)$$

$$V_R \frac{dC_{H_2}}{dt} = F_R(C_{H_{3in}} - C_{H_2}) - (r_1 S_1 + r_2 S_2) V_R \quad (7)$$

де V_A і V_R - обсяги абсорбційного бункеру і реактору відповідно,
 F - обсяг витрат води, що поступає в систему.

Згідно з проведеними розрахунками і побудованими по ним графіками (рис. 2) можна зробити висновок, що в процесі денітрифікації концентрація NO_3^- зменшується, концентрація NO_2^- - спочатку зростає, а потім зменшується внаслідок реакцій наведених у формулах (1), (2).

Процес денітрифікації - очищення води від нітратів, в процесі реакції виділяється газоподібний азот, який залишає систему, тому можна зробити висновок, що вода повністю очищена (OH^- ніяк не впливають на організм).

ORIGIN := 1

CNO30 := 20	CNO3in := 20	VA := 3.5	KNO3 := 0.18	Vmax1 := 20	S2 := 0.21
CNO20 := 0	CNO2in := 0	S1 := 0.14	KNO2 := 0.16	Vmax2 := 12.5	FR := 50
CH20 := 2.5	CH2in := 2		KH2 := 0.001	VR := 1.4	F := 0.6

$$r1(CNO3, CH2) := Vmax1 \cdot \frac{CNO3}{CNO3 + KNO3} \cdot \frac{CH2}{CH2 + KH2}$$

$$r2(CNO2, CH2) := Vmax2 \cdot \frac{CNO2}{CNO2 + KNO2} \cdot \frac{CH2}{CH2 + KH2}$$

$$c := \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$D(t, c) := \begin{bmatrix} \frac{F \cdot (CNO3in - c_1) - r1(c_1, c_3) \cdot VR}{VA + VR} \\ \frac{F \cdot (CNO2in - c_2) + r1(c_1, c_3) \cdot VR - r2(c_2, c_3) \cdot VR}{VA + VR} \\ \frac{FR \cdot (CH2in - c_3) - (r1(c_1, c_3) \cdot S1 + r2(c_2, c_3) \cdot S2) \cdot VR}{VR} \end{bmatrix}$$

$$M := Rkadapt(c, 0, 10, 100, D)$$

$$t := M^{(1)} \quad CNO3 := M^{(2)} \quad CNO2 := M^{(3)} \quad CH2 := M^{(4)}$$

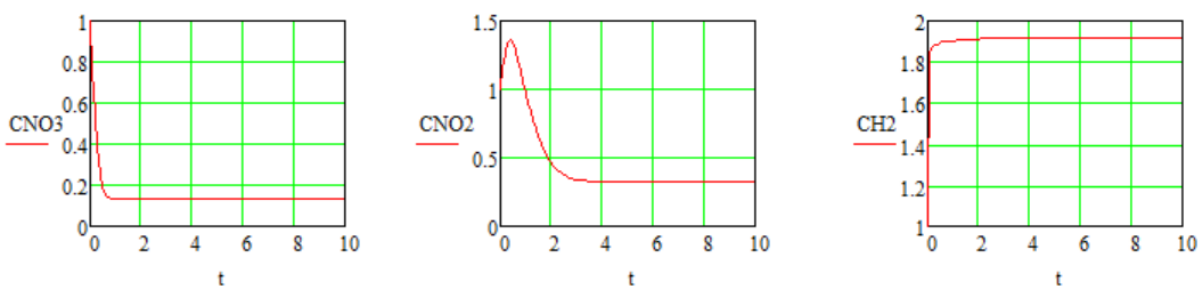


Рис. 2. Результати моделювання процесу денітрифікації питної води

Математичне моделювання процесу денітрифікації питної води дозволяє ефективно спроектувати установку води, а також забезпечити оптимізацію процесу установки. Розроблена модель покладена у програмний модуль, що буде використовуватися у системі «Контроль якості очищеної води на забруднених територіях».

Література

1. Гончарук В.В. SOS: Питьева вода // Химия и технология воды. – 2010. – 32, № 5. – С. 463–512.
2. Кравченко О.В., Панченко О.С., Мотроненко В.В., Смілянець Є.Я. Біологічна нітрифікація – денітрифікація у процесі підготовки питної води: сучасний стан і основні біологічні агенти // Innov Biosyst Bioeng, 2018, vol. 2, no. 1, 64–70.