

TEORETSKO-MATEMATIČKA OSNOVA PRIMJENE RAČUNALNE DINAMIKE FLUIDA U MODELIRANJU PROCESA OBRADE OTPADNIH VODA

THEORETICAL AND MATHEMATICAL BASIS OF COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS APPLICATION IN MODELING WASTEWATER TREATMENT PROCESSES

Elvis Žic*, Lucija Žagrić*, Dino Pršić*

Sažetak

Rad istražuje primjenu Računalne dinamike fluida (RDF, eng. Computational Fluid Dynamics, CFD) u analizi fizikalnih, kemijskih i bioloških procesa pročišćavanja otpadnih voda. RDF je suvremena metoda numeričkog modeliranja koja u obradi otpadnih voda omogućuje detaljnu simulaciju i vizualizaciju protoka fluida, miješanja i kemijskih reakcija unutar jedinica za obradu, što pomaže u optimizaciji dizajna i operativnih parametara. RDF može identificirati neučinkovitosti, poput mrtvih zona ili kratkog spoja u spremnicima, te podržati poboljšanja u aeraciji, sedimentaciji i doziranju kemikalija. Smanjenjem potrebe za fizičkim prototipovima i prilagodbama metodom pokušaja i pogrešaka, CFD doprinosi uštedi troškova, poboljšanim performansama obrade i održivijem razvoju sustava. Cilj rada je ukazati na primjenu RDF-a u projektiranju, optimizaciji i analizi postrojenja za pročišćavanje te potaknuti njegovu širu primjenu u struci i obrazovanju.

Ključne riječi: Računalna dinamika fluida (RDF), pročišćavanje otpadnih voda, fizikalni procesi, kemijski procesi, biološki procesi, numeričko modeliranje

Abstract

The article examines the application of Computational Fluid Dynamics (CFD) in the analysis of physical, chemical and biological processes in wastewater treatment. The use of CFD in wastewater treatment enables detailed simulation and visualization of

* Sveučilište u Rijeci, Građevinski fakultet, Radmile Matejčić 3, 51000 Rijeka

E-mail: {elvis.zic@uniri.hr; lzagric@uniri.hr; dprsic@student.uniri.hr}

fluid flow, mixing, and chemical reactions within treatment units, which helps optimize design and operational parameters. CFD can identify inefficiencies, such as dead zones or short-circuiting in tanks, and support improvements in aeration, sedimentation and chemical dosing. By reducing the need for physical prototyping and trial-and-error adjustments, CFD contributes to cost savings, enhanced treatment performance, and more sustainable system development. The aim of the paper is to highlight the application of CFD in the design, optimisation and analysis of wastewater treatment plants and to encourage wider application in professional and educational settings.

Key words: *Computational Fluid Dynamics (CFD), wastewater treatment, physical processes, chemical processes, biological processes, numerical modeling*

1. Uvod

Upotreba Računalne dinamike fluida (RDF) u pročišćavanju otpadnih voda donosi niz prednosti, uključujući mogućnost detaljne analize tokova, optimizaciju hidrauličkih uvjeta i identifikaciju neučinkovitih zona unutar uređaja za obradu [1,2]. RDF omogućuje virtualno testiranje različitih scenarija bez potrebe za fizičkim prototipima, čime se smanjuju troškovi i vrijeme razvoja. Osim toga, RDF doprinosi boljem razumijevanju kompleksnih interakcija između fizikalnih, kemijskih i bioloških procesa, što je ključno za učinkovito projektiranje i upravljanje sustavima za obradu otpadnih voda te značajno doprinosi očuvanju ekologije [1,3,4].

RDF predstavlja numeričku metodu koja se koristi za simulaciju toka fluida pomoću rješavanja Navier–Stokesovih jednadžbi [5,6], omogućuje detaljnu analizu strujanja, prijenosa tvari i energije te interakcije fluida s čvrstim tijelima. U kontekstu obrade otpadnih voda, RDF se primjenjuje za optimizaciju dizajna uređaja, analizu učinkovitosti procesa i identifikaciju potencijalnih problema u radu sustava [7-9].

Osim RDF-a, u analizi i modeliranju procesa pročišćavanja otpadnih voda koriste se i druge metode, poput empirijskih modela temeljenih na eksperimentalnim podacima, mehanističkih modela koji opisuju pojedinačne procese (npr. ASM modeli za biološku obradu), te statističkih i strojno-učećih metoda za predikciju ponašanja sustava na temelju povijesnih podataka [6,9,10]. Uz primjer sedimentacijskog spremnika, gdje se RDF koristi za analizu taloženja čestica, vrijedi spomenuti i aeracijske bazene u biološkoj obradi, gdje se RDF koristi za simulaciju miješanja, raspodjele otopljenog kisika i dinamike mikroorganizama [11]. Također, RDF se primjenjuje u denitrifikacijskim spremnicima, reaktorima s aktivnim muljem te UV dezinfekcijskim komorama [12].

Proces obrade otpadnih voda obuhvaća niz međusobno povezanih fizikalnih (sedimentacija, filtracija, flotacija, miješanje, prijenos topline), kemijskih (neutralizacija, oksidacija, precipitacija, adsorpcija) i bioloških procesa (razgradnja organskih tvari, nitrifikacija, denitrifikacija, uklanjanje fosfora), [3,5,8]. Ovi procesi raspoređeni su kroz različite stupnjeve obrade, počevši s primarnom obradom koja uključuje uklanjanje krutih tvari sedimentacijom, zatim sekundarnom obradom koja se temelji na biološkoj razgradnji otpadnih tvari, te završno tercijarnom obradom koja primjenjuje napredne metode za uklanjanje nutrijenata i mikroonečišćivača [11,12].

Računalna dinamika fluida primjenjuje se u svim fazama gdje je potrebno razumjeti i optimizirati tokove fluida, miješanje i prijenos tvari. Trenutna dostignuća uključuju integraciju RDF-a s biokemijskim modelima, razvoj 3D simulacija kompleksnih uređaja te primjenu u realnom vremenu za potrebe upravljanja postrojenjima [10]. U nastavku rada opisani su načini implementacije navedenih procesa u okviru RDF-a, s posebnim naglaskom na praktične primjere i mogućnosti optimizacije sustava.

2. Temeljni fizikalni procesi transporta

Transport se definira kao kretanje tvari fizikalnim procesima kao što su advekcija (ili konvekcija) i difuzija. Fizikalni transport, u sprezi s kemijskim i biološkim procesima, mijenja koncentraciju tvari u vodi. Stoga, da bi se utvrdilo je li pročišćena voda u skladu sa standardom kvalitete, važno je da modelar RDF-a razumije temeljne fizikalne procese transporta [11]. Potrebno je znati kako se ti fizikalni procesi matematički opisuju i rješavaju u računalnim modelima. Za parametar kvalitete vode ϕ , na primjer, temperaturu ili koncentraciju, generička transportna jednadžba ima oblik:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \phi}_{\text{vremenska izvedenica}} + \underbrace{\nabla \cdot (\phi \mathbf{u})}_{\text{konvekcija}} - \underbrace{\nabla \cdot (\gamma \nabla \phi)}_{\text{difuzija}} = \underbrace{S_\phi}_{\text{izvor/ponor}} \quad (1)$$

pri čemu je $\mathbf{u}$ brzina prijenosne tekućine, γ koeficijent difuzije, S_ϕ pojam izvora ili ponora, koji modelira proizvodnju ili potrošnju ϕ uzrokovanu fizikalnim, kemijskim ili biološkim procesima.

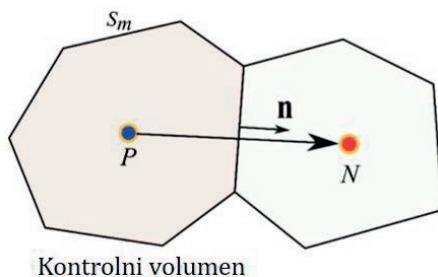
Generička količina ϕ često predstavlja koncentraciju. Ova generička transportna jednadžba je parcijalna diferencijalna jednadžba koja se sastoji od diferencijalnih operatora. Uobičajeni diferencijalni operatori uključuju vremensku derivaciju, gradijent, divergenciju, Laplaceov operator, kao i razne članove izvora i ponora [12,13]. Funkcionalni oblik

izraza izvora ili ponora može biti jednostavan ili složen, ovisno o tome je li funkcija ϕ sama za sebe i ako jest, je li linearna ili nelinearna funkcija.

Temeljna jednadžba (1) matematički je iskaz zakona očuvanja količine gibanja za ϕ . Njegovo razumijevanje može se olakšati korištenjem kontrolnog volumena uz razmatranje promjena ϕ unutar ovog volumena i preko njegove granice (Slika 1). Čelija P označava kontrolni volumen koji se razmatra, a čelija N je njegov susjed. Kontrolni volumen P ima volumen V , a njegova površina je označena kao S_m . Oznaka $\mathbf{n}$ predstavlja jedinični normalni vektor zajedničke površine između P i N . Budući da je ϕ koncentracija, a ukupna količina unutar kontrolnog volumena $\int \phi dV$, vremenska derivacija predstavlja vremensku stopu promjene ϕ unutar navedenog kontrolnog volumena:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi dV \quad (2)$$

koji može biti izazvan advekcijom i difuzijom preko granice, kao i unutarnjom proizvodnjom i potrošnjom [4].



Slika 1. Zakon očuvanja za kontrolni volumen

Advekcija je prijenos topline ili tvari tekućinom koja teče. Drugim riječima, to je advektivni transport nošene brzine tekućine. Pod pretpostavkom da je brzina $\mathbf{u}$ na granici kontrolnog volumena, tada se tok advektiran preko granice može procijeniti kao sljedeći površinski integral:

$$\oint_{S_m} \phi (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) dS \quad (3)$$

koji se dalje može napisati kao volumenski integral nakon pozivanja na Gaussov teorem:

$$\int_V \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) dV \quad (4)$$

Ovaj izraz opisuje transport i ima informacije o smjeru, definirane vektorima brzine toka. Još jedan često korišten izraz, konvekcija, odnosi se na gibanje izazvano prijenosom topline i uzgonom. U literaturi su mnogi znanstvenici koristili advekciju i konvekciju naizmjenično [5,8].

Pojam difuzije predstavlja gradijentni transport, što znači da se ϕ prenosi iz područja visoke koncentracije u područja niske koncentracije sve dok se ne postigne jednolika koncentracija. Kako se gradijent $\nabla\phi$ pokazuje uz koncentracijski nagib, a difuzijski transport je u suprotnom smjeru, tok preko granice kontrolnog volumena može se napisati kao:

$$q_s = -\gamma\nabla\phi \quad (5)$$

gdje je γ difuzivnost. Difuzija može biti uzrokovana raspršivanjem čestica tvari zbog slučajnih molekularnih gibanja (molekularna difuzija) ili zbog turbulentnih vrtloga (turbulentna difuzija) [13]. Izvođenjem površinskog integrala s ovim difuzijskim tokom, doprinos difuzije se može zapisati kao:

$$-\int_V \nabla \cdot (\gamma\nabla\phi) dV \quad (6)$$

Izvor ili ponor, odnosno proizvodnja i potrošnja ϕ unutar kontrolnog volumena može se opisati volumetrijskim intenzitetom S_ϕ . Stoga je doprinos izvora ili ponora unutar kontrolnog volumena opisan kao:

$$\int_V S_\phi dV \quad (7)$$

Sastavljajući sve članove zajedno, zakon očuvanja ϕ unutar kontrolnog volumena može se pisati kako slijedi:

$$\int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} \phi + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\gamma\nabla\phi) \right] dV = \int_V S_\phi dV \quad (8)$$

Ukoliko je kontrolni volumen beskonačno malen, integral u jednadžbi (8) trebao bi biti jednak nuli. Stoga se može izvesti predhodno navedena generička transportna jednadžba (1).

Temperatura je važan parametar za pročišćavanje otpadnih voda. Na mnoge kemijske i biološke procese u postrojenju za pročišćavanje utječu temperaturne varijacije [14,15]. Neravnomjerna raspodjela temperature uzrokuje neujednačenu gustoću tekućine u jedinici za tretman. Toplinski inducirani učinci uzgona utječu na hidrodinamiku unutar ovih jedinica. Mogu se pojaviti gravitacijske struje tako da se putanja toka promijeni u odnosu na proračun. Toplina povezana s otpadnim vodama koje se ispuštaju u površinske vode može stvoriti toplinske učinke na vodena staništa [16]. Stoga je prekomjerno toplinsko ispuštanje u rijeke i potoke iz uređaja za pročišćavanje otpadnih voda važan okolišni „stres” koji treba pratiti [17].

Temeljna jednadžba za toplinsku energiju, obično u smislu temperature, slična je generičkoj transportnoj jednadžbi (1). Kada je u suštini vidljiva samo konvekcija, na primjer, prijenos topline u tijelu mirne vode bez gravitacijskih učinaka ili krutom tijelu bez zračenja, problem se

može jednostavno simulirati jednadžbom difuzije. Prema Fourierovom zakonu kondukcije, tok toplinske energije $\mathbf{q}_T$ proporcionalan je temperaturnom gradijentu, tj. vrijedi:

$$\mathbf{q}_T = -k\nabla T \quad (9)$$

gdje je k toplinska vodljivost, a T temperatura. Radi jednostavnosti, k se pretpostavlja kao da je izotropna i konstantna toplinska vodljivost. Zakon očuvanja toplinske energije daje sljedeću jednadžbu vodljivosti:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T \quad (10)$$

gdje je ρ gustoća stupca tekućine, a C_p specifična toplota. Za nestlačivi fluid, toplinska energija je produkt $C_p T$. U stabilnom stanju, jednadžba (10) može se dalje pojednostaviti kao:

$$\nabla^2 T = 0 \quad (11)$$

što predstavlja Laplaceova jednadžba uzeta za T . Ako se tekućina kreće, tada vladajuća jednadžba postaje složenija dodavanjem člana konvekcije [15]. U ovom slučaju, jednadžba nestacionarne konvekcije i vodljivosti ima sličan oblik kao jednadžba nestacionarne advekcije i difuzije te poprima oblik:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) = k \nabla^2 T + S_T \quad (12)$$

gdje je $\mathbf{u}$ brzina fluida, a S_T izvor ili ponor topline. Treba imati na umu da je termin advekcije ovdje napisan drugačije nego u jednadžbi (1). Za viskoznu tekućinu, viskozni učinak nepovratno rasipa kinetičku energiju u toplinu. Doprinos izvora izazvan stvaranjem viskozne topline može se ocijeniti kao:

$$S_T = \mu \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 \right\} \quad (13)$$

Iz jednadžbe (13) može se vidjeti da je S_T član disipacije viskozne energije uvijek pozitivan. U stvarnosti, ovaj izraz ima zanemarivu veličinu u usporedbi s drugim članovima u jednadžbi prijenosa topline. Može biti značajan kada je brzina smicanja tekućine izuzetno visoka. Za većinu procesa obrade otpadnih voda, brzina smicanja je niska, pa se ovaj pojam može zanemariti.

3. Ostali fizikalni procesi povezani s tretmanom

3.1 Odvajanje čestica

Jedna od glavnih nečistoća u otpadnoj vodi su čestice suspendirane u dotoku. Te se čestice razlikuju po veličini, obliku, gustoći i biokemijskom sastavu. Glavni kriterij procesa obrade je učinkovito uklanjanje ovih čestica nečistoća uglavnom uz niz fizičkih procesa kao što su rešetanje, uklanjanje pijeska, sedimentacija (taloženje), flotacija i filtracija [7]. Ovi procesi fizičkog odvajanja mogu biti potpomognuti kemijskim i biološkim mjerama, kao što su koagulacija i flokulacija.

Rešetanje je fizičko uklanjanje čestica i otpada pomoću šipki i mreža. Voda se propušta kroz otvore između šipki ili mrežica, dok se krutine veće od otvora zadržavaju iza sita. Svrha mu je zaštita nizvodnih jedinica i opreme od začepjenja i abrazije. Kod proračuna dovoda vode treba uvažiti zaštitu ribe od uvlačenja ili udaranja u sito [18]. Rešetke je potrebno povremeno čistiti radi nesmetanog protoka i smanjenja gubitka visine. Sa stajališta RDF-a, modeliranje prosijavanja ovisi o vrsti sita i potrebi uvažavanja akumuliranih krutina. Za zaštitu šipki potrebno je dodatno modelirati njihove geometrijske detalje i otvore, dok to kod mrežaste zaštite nije praktično. S nakupljanjem otpada raste i otpor. Većina komercijalnih RDF kodova omogućuje uključivanje propusnih zona i različitih modela poroznih medija [8,10].

U sustavima za uklanjanje pijeska, guste čestice poput pijeska uklanjaju se gravitacijskim taloženjem ili drugim mehaničkim odvajanjem. Lakše čestice, poput organskih biokrutina, manje je vjerojatno da će se ukloniti. Uklanjanje pijeska obično slijedi nakon prosijavanja i prethodi primarnoj sedimentaciji. Postoji više tipova sustava temeljenih na različitim mehanizmima odvajanja: komore i kanali za pijesak, vrtložni sustavi i hidrocikloni. Za modeliranje procesa RDF-om važno je da kod može obuhvatiti mehanizam uklanjanja [18,19]. Primjerice, u vrtložnom sustavu treba uzeti u obzir centrifugalnu silu na čestice. Kako je teško pratiti svaku česticu, postoje dvije opcije: modelirati koncentraciju (Eulerov pristup) ili putanje reprezentativnih čestica, iz kojih se zaključuje o transportu i zadržavanju čestica.

Sedimentacija se odnosi na uklanjanje čestica težih od vode gravitacijskim taloženjem u spremniku ili bazenu. Dok tok prolazi jedinicom, voda nosi čestice, a gravitacija ih usmjerava prema dnu. Teške čestice brže se talože i tvore sloj mulja koji treba ukloniti, dok se lakše često ne stignu spustiti. Stoga pri projektiranju (dimenzioniranju) taložnika treba uvažiti raspodjelu veličine čestica. Tok je obično turbulentan, a mješavina vode i čestica, posebno u sloju mulja, pokazuje

nenewtonsko ponašanje. Povećana koncentracija utječe na taloženje jer bliske čestice ometaju slijeganje. Sve se to mora uvažiti u RDF modelima za procjenu učinka slijeganja. Kao i kod uklanjanja pijeska, modeliranje sedimentacije može koristiti Eulerov ili Lagrangeov pristup.

Flotacija koristi male plinske mjehuriće za hvatanje krutina i njihovo isplivavanje. Može djelomično ukloniti fine čestice koje ne padaju taloženjem. Zahtijeva manje prostora od taloženja i daje koncentriraniji mulj. Potreban je stalni dotok komprimiranog zraka. Flotacija se primjenjuje za uklanjanje ulja, masti, proteina i mesnih otpadaka. U RDF modelima treba obuhvatiti višefazni tok zbog zraka te zarobljavanje krutina u mjehurićima [2,4,20].

U procesu filtracije, niske koncentracije suspendiranih čestica uklanjaju se prolaskom vode kroz porozni medij, najčešće pijesak. Tijekom protoka kroz pore, čestice se zadržavaju izravnim presretanjem, difuzijom (Brownovo gibanje), inercijskim taloženjem, sedimentacijom i hidrodinamičkim sudarom. Nakupljanje čestica može začepiti pore i smanjiti učinkovitost, pa je potrebno povratno ispiranje. Filtracija može raditi gravitacijski ili pod tlakom. Gravitacijska je sporija zbog ograničene visine pritiska, dok je tlačna brža i zahtijeva manje prostora. U RDF modelima filter se opisuje kao zona s dodatnim otporom toku [10,12,18]. Crittenden i sur. [10] u svom radu istražuju filtraciju kao ključnu fazu obrade vode, analiziraju učinkovitost filtracijskih jedinica te ističu važnost održavanja propusnosti filtera i razlike između gravitacijskih i tlačnih sustava. U radu Grady i sur. [12] proučava se biološka obrada otpadnih voda, naglašavajući kako filtracija dopunjuje biološke procese, osobito u fazi naknadne obrade radi postizanja visoke kvalitete izlazne vode. Le Moullec i sur. [18] provode CFD simulacije za analizu hidrodinamike i ponašanja čestica u reaktorima, čime pridonose boljem razumijevanju učinkovitosti filtracijskih sustava i hidrauličkog otpora.

4. Kemijski procesi

Kemikalije se koriste uz procese fizikalne obrade kako bi se postigli različiti standardi kvalitete vode tijekom obrade otpadnih voda. Modeliranje unutar RDF-a dragocjeno je za predviđanje koncentracije kemikalija na ispustima ili unutar jedinica za obradu. Općenito, kemijske reakcije u pročišćavanju otpadnih voda mogu se kategorizirati u pet skupina: kemijsko taloženje, kemijska koagulacija, kemijska oksidacija, ionska izmjena i kemijska stabilizacija [3,5].

Kemijsko taloženje najčešća je metoda uklanjanja otopljenih metala iz otpadne vode koja sadrži toksične metale. Da bi se otopljeni metali

pretvorili u krute čestice, smjesi se dodaje reagens za taloženje. Kemijska reakcija potaknuta reagensom uzrokuje njihovo stvaranje, a čestice se zatim uklanjaju filtracijom. Učinkovitost procesa ovisi o vrsti i koncentraciji metala te vrsti reagensa.

Kemijska koagulacija uključuje destabilizaciju čestica kako bi se one agregirale tijekom flokulacije. Fine krute čestice u vodi nose negativne površinske naboje, što ih sprječava da formiraju veće skupine i talože se. Koagulansi s pozitivnim nabojem smanjuju taj naboj, nakon čega čestice slobodno tvore veće skupine. U smjesu se zatim dodaje anionski flokulant koji neutralizira skupine ili stvara mostove između njih, povezujući ih u veće agregate. Kada se formiraju, čestice se uklanjaju sedimentacijom.

Kemijska oksidacija uvodi oksidirajuće sredstvo (npr. klor ili ozon) koje prenosi elektrone ciljnim kemikalijama u vodi. One zatim prolaze strukturnu modifikaciju i postaju manje destruktivne. Alkalno kloriranje koristi klor protiv cijanida, no može stvoriti toksične klorirane spojeve, pa su potrebni dodatni koraci. Napredna oksidacija uklanja organske spojeve nastale kao nusprodukti kemijske oksidacije kroz procese, poput parnog ili zračnog uklanjanja te adsorpcije aktivnim ugljenom.

Ionska izmjena je tehnologija koja se koristi za uklanjanje tvrdoće i raznih kontaminanata iz vode, poput nitrata, perklorata, arsena, bromida, otopljenog organskog ugljika, kobalta i urana [14]. U postupku omekšavanja se pozitivno nabijeni natrijevi ioni uvode u obliku soli natrijeva klorida ili slane vode. Ioni kalcija i magnezija zamjenjuju mjesta s natrijevima, dok se slobodni natrijevi ioni otpuštaju u vodu. Nakon obrade velike količine vode, otopina se zasiti kalcijem i magnezijem, pa je treba obnoviti natrijevim ionima.

Kemijska stabilizacija djeluje slično oksidaciji. Mulj se tretira oksidansom, poput klora. Time se usporava biološki rast i smanjuje neugodan miris, a voda se uklanja iz mulja [21].

4.1 Transport kemijskih tvari

Prijenos kemijskih tvari u vodi može se matematički prikazati općom jednadžbom advekcije-difuzije-reakcije kako slijedi:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial C_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_i \frac{\partial C_i}{\partial x_j} \right) = S_i \quad (14)$$

gdje je u_i brzina toka (LT^{-1}), C_i koncentracija tvari (ML^{-3}), D_i efektivna difuznost (kombinacija molekularne i turbulentne difuzije) za kemijske tvari (L^2T^{-1}) te S_i pojam vanjskog volumetrijskog izvora ($ML^{-3}T^{-1}$) uključujući proizvodnju, potrošnju i prijenos u drugu fazu. Vanjski

volumetrijski izvorni član, S_i , na desnoj strani jednadžbe (14), predstavlja brzinu kemijske promjene uzrokovanu kemijskim reakcijama. Izvorni termini koji se često koriste za dezinfekciju ozonom navedeni su u Tablici 1. U ovoj tablici k_d predstavlja konstantu raspadanja ozona, C_l je koncentracija otopljenog ozona, k_{NOM} konstanta brzine reakcije za reakciju između otopljenog ozona i koncentraciju prirodne organske tvari (*eng. NOM*), dok je k_B konstanta brzine stvaranja bromata. Treba napomenuti da su k_d i k_B konstante brzine reakcije prvog reda (T^{-1}), dok je k_{NOM} konstanta brzine reakcije drugog reda ($M^{-1}L^3T^{-1}$).

Tablica 1. Često korišteni izvorni pojmovi u transportu kemijskih tvari i jednadžbe za dezinfekciju ozonom

Kemijska tvar	Izvorni pojmovi u transportnim jednadžbama	Literatura
Otopljeni ozon, C_l	$S_{C_l} = -k_d C_l$	Huang i sur. (2004.) [20]; Li i sur. (2021.) [22]
Koncentracija NOM-a	$S_{[NOM]} = -k_{NOM} [NOM] C_l$	Dooil i sur. (2009.) [23]; Cai i sur. (2024.) [24]
Bromat, C_B	$S_{C_B} = k_B C_l$	Tang i sur. (2005.) [25]
CT (vrijeme koncentracije)	$S_{CT} = C_l$	Zhang (2006.) [26]; Zhang i sur. (2014.) [27]

Huang i sur. (2004.) primijenili su RDF modeliranje za analizu hidrodinamike i prijenosa ozona u kontaktoru, čime su procijenili učinkovitost procesa dezinfekcije, dok su Li i sur. (2021.) razvili numerički model koji spaja prijenos mase i reakcijske procese s ciljem optimizacije dizajna sustava ozonske oksidacije otpadnih voda i primjene jednadžbi za opis dezinfekcije. Dooil i sur. (2009.) optimizirali su dizajn ozonskog kontaktora pomoću specijaliziranog softvera, fokusirajući se na prijenos ozona i učinkovitost dezinfekcije kroz matematičko modeliranje. Cai i sur. (2024.) u svom radu daju pregled mehanizama prijenosa i reakcija ozona u vodi, razmatrajući jednadžbe dezinfekcije te izazove primjene u uklanjanju patogena. U radu Tang i sur. (2005.) modelirana je inaktivacija oocista *Cryptosporidium parvum* i nastanak bromata u punom mjerilu ozonskog kontaktora, povezujući prijenos ozona i reakcijske jednadžbe dezinfekcije s rizikom formiranja nusprodukta. Zhang (2006.) te Zhang i sur. (2014.) istražuju u svojim radovima prijenos ozona i hidrodinamiku kontaktora pomoću RDF-a, fokusirajući se na povezanost vremena zadržavanja,

koncentracije i jednadžbi dezinfekcije za procjenu učinkovitosti obrade vode.

5. Biološki procesi

Osim fizikalnih i kemijskih procesa pročišćavanja otpadnih voda, uključeni su i biološki procesi. Tehnologija biološke obrade, samim time i biološki procesi (npr. inaktivacija), uobičajeni su kod dezinfekcije vode. Obično se koriste tehnologije biološkog pročišćavanja, kao što su sustavi s aktivnim muljem i kanali za alge [14-17]. Uobičajeno načelo tehnologija biološke obrade otpadnih voda je korištenje mikroorganizama kao što su bakterije (aerobno ili anaerobno), alge i gljivice (aerobno) za konzumiranje ili razgradnju organskih tvari u otpadnoj vodi i posljedično čišćenje otpadne vode. Mnogi biološki procesi uključeni u pročišćavanje otpadnih voda dobro su opisani u knjigama autora Grady i sur. (2011.) [12], te Crittenden i sur., 2012. [10]. Inaktivacija, proces aktivnog mulja i biološki proces rasta mikroalgi tri su primjera bioloških procesa.

Sredstva za dezinfekciju koja se obično koriste u obradi vode i otpada su slobodni klor, kombinirani klor (klor u kombinaciji s amonijakom, također poznati kao kloramini), klor dioksid, ozon i UV zrake. Prva četiri su kemijski oksidansi, dok UV zrake uključuju korištenje elektromagnetskog zračenja. Inaktivacija ovisi o svojstvima pojedinog mikroorganizma, dezinfekcijskog sredstva i vode. Osim toga, uočene brzine reakcija mogu varirati za čak šest redova veličine od jednog organizma do drugog, čak i za jedan dezinficijent, a brzine reakcija dobro poznatih reakcija dezinfekcije (npr. UV zrake) variraju za jedan i pola reda veličine. Unatoč tome, Chick-Watsonov model dezinfekcije [5], jednostavan i široko korišten kinetički model pokazao se korisnim u mnogim primjenama, a može se pisati na sljedeći način:

$$\ln \frac{N}{N_0} = -k_c C^n t \quad (15)$$

pri čemu su N broj mikroorganizama (L^{-3}), N_0 početni broj mikroorganizama (L^{-3}), k_c konstanta brzine inaktivacije (jedinice ovise o n), C koncentracija dezinficijensa (ML^{-3}), dok je t vrijeme kontakta (T). EkspONENT n varira ovisno o dezinficijensu i vrsti mikroorganizama i obično se pretpostavlja s vrijednosti 1. Konstanta brzine dezinficijensa također ovisi o dezinficijensu i vrsti mikroorganizama te je osjetljiva na okolišne uvjete u vodi. Opće načelo izvedeno iz Chick-Watsonovog modela je da kako se produkt koncentracije dezinficijensa i vremena kontakta povećava (*eng. CT*), inaktivacija mikroorganizama se pojačava. Praktično, vrijednost CT se može koristiti kao pokazatelj učinkovitosti dezinfekcije.

Stoga se kod modeliranja inaktivacije, umjesto rješavanja transportne jednadžbe za mikroorganizme [3], može pisati sljedeća formulacija:

$$\frac{\partial N_m}{\partial t} + u_j \frac{\partial N_m}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_i \frac{\partial N_m}{\partial x_j} \right) = S_{N_m} \quad (16)$$

pri čemu su N_m koncentracija mikroorganizma m (L^{-3}), dok je S_{N_m} vanjski volumetrijski izvor za mikroorganizam m ($L^{-3}T^{-1}$). Pogodnije je riješiti transportnu jednadžbu za CT prema Zhang i sur. (2014.), koja je slična jednadžbama (15) i (16) i može se napisati kao [13]:

$$\frac{\partial (CT)}{\partial t} + u_j \frac{\partial (CT)}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial (CT)}{\partial x_j} \right) = S_{CT} \quad (17)$$

Izvorni pojam gornje formule je definiran kao:

$$S_{CT} = C_{O_3} \quad (18)$$

gdje je C_{O_3} koncentracija otopljenog ozona (ML^{-3}). Treba imati na umu da se jednadžbe (16) i (17) mogu integrirati u RDF modele.

5.1 Proces aktivnog mulja

U postrojenju za pročišćavanje otpadnih voda ili industrijskih otpadnih voda, proces aktivnog mulja je biološki proces koji se može koristiti za oksidaciju biološke tvari koja sadrži ugljik, oksidaciju dušične tvari, uglavnom amonijaka i dušika u biološkoj tvari te uklanjanje hranjivih tvari (dušik i fosfor), [18,19]. Glavni tok modeliranja procesa s aktivnim muljem slijedi niz modela s aktivnim muljem (*eng. ASM*), koje su objavili Henze i sur. (2000.) opisano u radu [19]. Postoje tri tipa ASM modela koji se nazivaju ASM1, ASM2 i ASM3. Prema pregledu Meistera i sur. (2017.) [2], iako modeli ASM1 [19] i ASM3 [28] oba uzimaju u obzir biološke procese oksidacije ugljika, nitrifikacije i denitrifikacije, koncepti se razlikuju u opisu heterotrofnog rasta i propadanja. Za koncept raspadanja, ASM1 koristi model odumiranja-regeneracije, dok ASM3 razmatra endogeno disanje. Za koncept rasta, heterotrofne bakterije označene s XBH izravno konzumiraju lako dostupan biorazgradivi supstrat SS u ASM1, dok je rast odgođen uzimajući u obzir skladištenje unutarnjih staničnih spojeva u ASM3. ASM2 [19] se ističe uključivanjem procesa biološkog uklanjanja fosfora u formulaciju modela. Kombinirana značajka ovih ASM modela daje opis biološkog tretmana nizom biokinetičkih procesa, koji su izraženi kao sustav običnih diferencijalnih jednadžbi. Najčešće korišteni ASM model u RDF-u je ASM1, koji se sastoji od 13 spojeva i 8 biokinetičkih procesa [19,28]. U radu Corominas i sur. [19] dokazano je da se modeli aktivnog mulja mogu učinkovito koristiti za provjeru i unaprjeđenje smjernica pri projektiranju uređaja za obradu otpadnih voda. Savun-Hekimoğlu [28] je u

svom radu pokazao da su ASM1 i ASM3 modeli temeljni alati za opis dinamike bioloških procesa, pri čemu se ASM1 posebno ističe zbog široke primjene u RDF-u. Zajedno potvrđuju važnost matematičkog modeliranja u optimizaciji i pouzdanosti sustava obrade otpadnih voda.

5.2 Biološki proces rasta mikroalgi

Biološki proces rasta mikroalgi nova je tehnologija za pročišćavanje otpadnih voda i dobivanje bioenergije kroz uzgoj mikroalgi korištenjem hranjivih tvari iz otpadnih voda. Na proces rasta mikroalgi ne utječu samo uvjeti okoliša kao što su temperatura, zračenje i koncentracije hranjivih tvari, već i fizički procesi, kao što je protok tekućine i sedimentacija čestica.

Prema preglednom radu Parka i Lija (2015.) [29], biološki proces rasta mikroalgi i utjecaj različitih parametara temeljito su proučavani i modelirani u proteklom desetljećima. Monodov model i model stanične kvote uspostavljeni su kao temeljne metode za opisivanje ograničenja hranjivim tvarima u reproduktivnim stopama fitoplanktona, a dalje su evoluirali u složenije oblike [30]. Iako se navodi da model stanične kvote točnije prikazuje rast ograničen hranjivim tvarima nego Monodov model, poteškoće u mjerenju neovisnih varijabli u prvom potaknule su razvoj modela koji koristi Monodovu jednadžbu [32]. Učinci zračenja i njegove promjene dinamike ovisne o koncentraciji stanica i dubini suspenzije također su modelirani i doveli su do proučavanja modela koji uključuju učinke hranjivih tvari i svjetla [15,16].

Kako bi se biokinetički proces integrirao u RDF model, biomasa, koncentracija ugljičnog dioksida i koncentracija dušika mogu se modelirati korištenjem transportne jednadžbe slične jednadžbi (16) s izvornim izrazom. Izvorni pojam algi može se izraziti prema [31]:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{F}{V}(X_0 - X) + \mu X - DX \quad (19)$$

gdje su F volumetrijski protok (L^3T^{-1}), V volumen elementa (L^3), X_0 utjecajna masena koncentracija algi (ML^{-3}), X masena koncentracija algi u efluentu (ML^{-3}), μ specifična stopa rasta algi (T^{-1}), te D koeficijent odumiranja (T^{-1}). Specifična stopa rasta može se izraziti kao kombinirani proizvod učinaka koncentracije ugljičnog dioksida (C), koncentracije dušika (N), zračenja (I) i temperature (T). Učinci CO_2 , dušika i zračenja mogu se izraziti u obliku funkcija tipa Monod [14]. Primjer modela za specifičnu stopu rasta μ može se izraziti preko sljedećeg izraza:

$$\mu = \mu_{max} \left(\frac{C}{K_C + C} \right) \left(\frac{N}{K_N + N} \right) \left(\frac{I}{K_I + I} \right) g(T) \quad (20)$$

gdje su $\mu_{\max}$ maksimalna specifična stopa rasta (T^{-1}), C koncentracija otopljenog efluenta CO_2 (ML^{-3}), N koncentracija anorganskog dušika (ML^{-3}), I zračenje na određenoj dubini bazena ($L^2T^{-1}N$), K_C, K_N i K_I predstavljaju konstante poluzasićenja za rast stanica koje ovise o ugljičnom dioksidu, dušiku i zračenju ($ML^{-3}, ML^{-3}, L^2T^{-1}N$), dok $g(T)$ predstavlja funkciju temperature koja se može izraziti pretpostavkom eksponencijalne varijacije uzrokovane neoptimalnom temperaturom [17]:

$$g(T) = e^{-m(T-T_{opt})^2} \quad (21)$$

gdje su m empirijska konstanta za neoptimalnu temperaturu (-), T temperatura (Θ), odnosno T_{opt} optimalna temperatura za autotrofni rast (Θ). Dobar primjer integrirajućeg biokinetičkog modela rasta mikroalgi s RDF-om dali su Park i Li (2015.) u znanstvenom radu [29].

6. Zaključak

Proces obrade otpadnih voda izuzetno je kompleksan jer obuhvaća istodobno odvijanje fizikalnih, kemijskih i bioloških procesa, čija međusobna interakcija značajno utječe na učinkovitost sustava. U ovom radu dan je detaljan matematičko-teorijski opis temeljnih procesa transporta, reakcija i biokinetike, pri čemu su korištene parcijalne diferencijalne jednadžbe za opis gibanja fluida, prijenosa topline, tvari i dinamike mikroorganizama. Ovaj teorijski okvir pruža čvrstu osnovu za implementaciju Računalne dinamike fluida (RDF) u modeliranje, simulaciji i optimizaciji procesa pročišćavanja otpadnih voda.

Implementacija RDF-a prikazana u radu obuhvaća modeliranje ključnih faza obrade – od sedimentacije, filtracije i flotacije, do kemijskih reakcija, poput oksidacije i koagulacije, te bioloških procesa uklanjanja hranjivih tvari i rasta mikroalgi. Na taj način RDF omogućuje realističnu simulaciju uvjeta u postrojenjima, identifikaciju neučinkovitosti i optimizaciju dizajna. Posebno je važno naglasiti kako RDF omogućuje analizu energetske potrebe (npr. miješanja i aeracije) te procjenu utjecaja promjena radnih parametara na performanse cijelog sustava.

Trenutačna dostignuća u ovom području uključuju integraciju RDF-a s biokemijskim modelima, razvoj trodimenzionalnih simulacija složenih uređaja te primjenu modela u realnom vremenu za potrebe nadzora i upravljanja postrojenjima. Unatoč značajnom napretku, postoji prostor za poboljšanje u praksi, primjerice u daljnjem smanjenju računalnih zahtjeva simulacija, boljoj integraciji s modelima temeljenima na strojnom učenju te u razvoju metodologija za prijenos rezultata simulacija u konkretne inženjerske odluke i smjernice za upravljanje.

RDF se potvrđuje kao neizostavan alat u suvremenom pročišćavanju otpadnih voda jer omogućuje sveobuhvatnu optimizaciju procesa, smanjenje troškova, povećanje energetske učinkovitosti i doprinos održivom upravljanju resursima. Njegova daljnja primjena i razvoj značajno će unaprijediti učinkovitost i održivost sustava obrade otpadnih voda u budućnosti.

Literatura

- [1] Zhang, J., Tejada-Martínez, A.E. and Zhang, Q. (2014) Developments in CFDs-Based Modeling for Disinfection Technologies over the Last Two Decades: A review. *Environmental Modelling & Software*, 58: 71-85.
- [2] Meister, M., Winkler, D., Rezavand, M. and Rauch, W. (2017) Integrating Hydrodynamics and Biokinetics in Wastewater Treatment Modelling by Using Smoothed Particle Hydrodynamics. *Comp. and Chem. Engineering*, 99: 1-12.
- [3] Wols, B.A., Hofman, J.A.M.H., Uijttewaalt, W.S.J., Rietveld, L.C. and Van Dijk, J.C. (2010) Evaluation of Different Disinfection Calculation Methods Using CFD. *Environmental Modelling & Software*, 25(4): 573-582.
- [4] Glover, G.C., Printemps, C., Essemiani, K. and Meinhold, J. (2006) Modelling of Wastewater Treatment Plants - How Far Shall We Go with Sophisticated Modelling Tools? *Water Science and Technology*, 53(3): 79-89.
- [5] Saliu, A.A., Zamathula, S.N., Fasasi, L.E., Rasheed, O.A., Rasheed, K.O. (2025) Breakthrough Innovations in Water Treatment Process Engineering: A Review of Recent Advances and Future Directions. *MAR 2025, IRE Journals*, Vol. 8, Issue 9, ISSN: 2456-8880
- [6] Zhang, J.P. (2006) An Integrated Design Approach for Improving Drinking Water Ozone Disinfection Treatment Based on CFD. Ph.D. Dissertation, University of Waterloo.
- [7] Eddy, M. (2014) *Wastewater Engineering: Treatment and Resource Recovery*. 5th ed. New York: McGraw-Hill Education.
- [8] Hager, W. (2010) *Wastewater Hydraulics: Theory and Practice*. 2nd ed. New York: Springer.
- [9] Versteeg, H., and Malalasekera, W. (2007) *An Introduction to CFD: The Finite Volume Method*. 2nd ed. London: Pearson Education.
- [10] Crittenden, J.C., Trussell, R.R., Hand, D.W., Howe, K.J. and Tchobanoglous, G. (2012) *MWH's Water Treatment: Principles and Design*. Hoboken, NJ: Wiley.
- [11] Lei, L. and Ni, J. (2014) Three-Dimensional Three-Phase Model for Simulation of Hydrodynamics, Oxygen Mass Transfer, Carbon Oxidation, Nitrification and Denitrification in an Oxidation Ditch. *Water Research*, 53: 200-214.
- [12] Grady, C.L., Daigger, Jr.G.T., Love, N.G. and Filipe, C.D. (2011) *Biological Wastewater Treatment*. CRC Press.
- [13] Zhang, J., Tejada-Martinez, A.E., Zhang, Q. and Lei, H. (2014) Evaluating Hydraulic and Disinfection Efficiencies of a Full-Scale Ozone Contactor Using a RANS-Based Modeling Framework. *Water Research*, 52: 155-167.

- [14] Muñoz-Tamayo, R., Mairet, F. and Bernard, O. (2013) Optimizing Microalgal Production in Raceway Systems. *Biotechnology Progress*, 29(2): 543-552.
- [15] Bernard, O. (2011) Hurdles and Challenges for Modelling and Control of Microalgae for CO₂ Mitigation and Biofuel Production. *Journal of Process Control*, 21(10): 1378-1389.
- [16] Quinn, J., De Winter, L. and Bradley, T. (2011) Microalgae Bulk Growth Model with Application to Industrial Scale Systems. *Bioresource Technology*, 102(8): 5083-5092.
- [17] James, S.C. and Boriah, V. (2010) Modeling Algae Growth in an Open-Channel Raceway. *Journal of Computational Biology*, 17(7): 895-906.
- [18] Le Moullec, Y., Gentric, C., Potier, O. and Leclerc, J.P. (2010) CFD Simulation of the Hydrodynamics and Reactions in an Activated Sludge Channel Reactor of Wastewater Treatment. *Chem. Eng. Sci.*, 65 (1): 492-498.
- [19] Corominas, L., Flores-Alsina, X., Muschalla, D., Neumann, M.B., Vanrolleghem, P.A. (2023), Verification of WWTP Design Guidelines with Activated Sludge Process Models, WEFTEC 2010, 11 pages
- [20] Huang, T., Brouckaert, C.J., Pryor, M. and Buckley, C.A. (2004) Application of CFD Modeling to an Ozone Contactor. *Water SA*, 30(1): 51-56.
- [21] Crittenden, J.C., Trussell, R.R., Hand, D.W., Howe, K.J. and Tchobanoglous, G. (2012) *MWH's water treatment: Principles and design*. Hoboken, NJ: Wiley.
- [22] Li, H., Yi, F., Li, X. et al. (2021) Numerical Modeling of Mass Transfer Processes Coupling with Reaction for the Design of the Ozone Oxidation Treatment of Wastewater. *Frontiers of Chemical Science and Engineering*, 15, 602–614, <https://doi.org/10.1007/s11705-020-1963-4>
- [23] Dooil, K., Chaeyoung, L., Woohyeun, J., Seockheon, L. (2009) Design Optimization of an Ozone Contactor Using Ozone Contactor Model Software, *Environ. Eng. Res.* 2009, 14(4): 244-249
- [24] Cai, Y., Zhao, Y., Wang, C. et al. (2024) Ozone Disinfection of Waterborne Pathogens: A Review of Mechanisms, Applications and Challenges. *Environ. Sci. Pollut. Res.* 31, 60709–60730, <https://doi.org/10.1007/s11356-024-34991-3>
- [25] Tang, G., Adu-Sarkodie, K., Kim, D., Kim, J.H., Teefy, S., Shukairy, H.M. and Marinas, B.J. (2005) Modeling *Cryptosporidium Parvum* Oocyst Inactivation and Bromate Formation in a Full-Scale Ozone Contactor. *Environ. Sci. Technol.*, 39 (23): 9343-9350.
- [26] Zhang, J.P. (2006) An Integrated Design Approach for Improving Drinking Water Ozone Disinfection Treatment Based on CFD. Department of Civil Engineering, Ph.D. dissertation, University of Waterloo.
- [27] Zhang, J., Tejada-Martinez, A.E., Zhang, Q. and Lei, H. (2014) Evaluating Hydraulic and Disinfection Efficiencies of a Full-Scale Ozone Contactor Using a RANS-Based Modeling Framework. *Water Res.*, 52: 155-167.
- [28] Savun-Hekimoğlu, B. (2021) On the Use of Mathematical Models for Wastewater Treatment: A Review and Analysis of Activated Sludge Models

- ASM1 and ASM3, International Journal of Environment and Geoinformatics, 8(1):001-018
- [29] Park, S. and Li, Y. (2015) Integration of Biological Kinetics and Computational Fluid Dynamics to Model the Growth of *Nannochloropsis Salina* in an Open Channel Raceway. *Biotechnol. Bioeng.*, 112 (5): 923-933.
- [30] Hagstrom, G.I., Stock, C.A., Luo, J.Y., Levin, S.A. (2024). Impact of Dynamic Phytoplankton Stoichiometry on Global Scale Patterns of Nutrient Limitation, Nitrogen Fixation, and Carbon Export. *Global Biogeochemical Cycles*, 38, e2023GB007991. <https://doi.org/10.1029/2023GB007991>
- [31] Yang, A. (2011) Modeling and Evaluation of CO₂ Supply and Utilization in Algal Ponds. *Ind. Eng. Res.* 50 (19): 11181-11192.