

Yurii RYBACHUK, Andrzej JODŁOWSKI

Politechnika Łódzka, Wydział Budownictwa,
Architektury i Inżynierii Środowiska
al. Politechniki 6, 90-924 Łódź
e-mail: andrzej.jodlowski@p.lodz.pl

Symulacja procesu powstawania agregatów podczas flokulacji domieszek wód powierzchniowych

Simulation of the Aggregates Formation during Flocculation of Surface Water Admixtures

The main aim of the article is to analyse physical and chemical factors affecting the structure and strength of aggregates generated during coagulation and flocculation of water admixtures in the aspect of computer process simulation. The proposed mathematical relationships were used for computer modelling of the process and visualization of the obtained results. The results of the operation and visualization of the algorithms are presented in graphical form. Laboratory tests were carried out in order to check the correctness of the proposed algorithm.

Keywords: coagulation/flocculation, simulation of particle aggregation, dynamics of mixing of liquid

Wstęp

Wody powierzchniowe, które są często wykorzystywane do celów wodociągowych, zawierają zwykle różnego rodzaju domieszki, w tym substancje koloidalne i zawiesiny o wysokim stopniu dyspersji. Trudne do usunięcia z wody są koloidy z uwagi na ich stabilność [1, 2]. Destabilizację cząstek koloidalnych można uzyskać na drodze koagulacji chemicznej, która jest bardzo złożonym procesem z uwagi na wpływ wielu czynników fizycznych i chemicznych, do których można zaliczyć m.in. pH i temperaturę wody, potencjał ζ cząstek, rodzaj koagulantu i jego dawkę, czas przebiegu procesu i warunki hydrodynamiczne panujące w komorze flokulacji. Opracowane dotychczas podstawowe teorie dotyczące procesu koagulacji/flokulacji, oparte głównie na teorii szybkiej koagulacji Smoluchowskiego, pozwalają na analizę przebiegu procesu i określenie przebiegu agregacji wyrażanej w postaci zmniejszania liczby cząstek w jednostce objętości cieczy w czasie [3]. Rozwój podstawowej teorii pozwala na tworzenie matematycznych modeli flokulacji, które uwzględniają proces w bardziej szczegółowy sposób, a mianowicie charakteryzują wielkość, wytrzymałość i gęstość powstałych agregatów (kłaczków) [4]. Należy

również zauważyć, że nowsze modele uwzględniają mechanizm niszczenia kłaczków podczas flokulacji.

Szybki rozwój technologii komputerowych pozwala na implementację zaawansowanych algorytmów w interpretacji istniejących teorii i modeli matematycznych, a także wizualizacji przebiegu procesu [5-7]. Do symulacji i wizualizacji wykorzystywane są modele matematyczne i algorytmy umożliwiające uzyskanie wyników w wymiarze 2D. Wady tych algorytmów obejmują zastosowanie predefiniowanej liczby cząstek pierwotnych wchodzących w skład struktury agregatów.

Głównym celem niniejszej pracy jest próba zastosowania modelu matematycznego procesu flokulacji oraz opracowanych algorytmów, które pozwalają przewidzieć siłę, masę i objętość agregatów (kłaczków) składających się z cząstek pierwotnych. Zaproponowany algorytm zastosowano do budowy programu komputerowego, który pozwolił na przeprowadzenie symulacji z użyciem przyjętych danych i warunków początkowych. Drugim celem było opracowanie algorytmu wizualizacji agregatów, który pozwala przedstawić kształt i wielkość kłaczków w przestrzeni 3D. Trzecim celem pracy było sprawdzenie możliwości wykorzystania proponowanego modelu na podstawie wyników badań laboratoryjnych.

1. Modelowanie procesu flokulacji

1.1. Podstawowe zależności

Analiza flokulacji z uwzględnieniem sił o niewielkim zasięgu wpływających na agregację cząstek oraz sił hydrodynamicznych działających w komorze flokulacji umożliwia symulację powstawania agregatów w przestrzeni 3D, przebiegającego w konsekwencji łączenia cząstek pierwotnych przy założonych parametrach przebiegu procesu. Siły, które wpływają na agregację cząstek koloidalnych lub ich destrukcję, można wyrazić za pomocą równania bilansowego sił, które ulegają zmianom w czasie przebiegu procesu (F_{bil}). Jako miarę sił działających na powstający agregat (kłaczek) należy uwzględnić siłę Coulomba (F_{Co}), siłę van der Waalsa (F_{vdW}), siłę Archimedesesa (F_A), siłę odśrodkową (F_{od}) oraz siłę grawitacji (F_g). Równanie równowagi (1) przedstawia bilans sił, które można podzielić na dwie grupy, a mianowicie siły agregacji i siły rozpadu agregatów. Dodatnia wartość siły bilansowej wskazuje na wzrost wielkości i masy agregatów, natomiast ujemna wartość tych sił wiąże się z niszczeniem agregatów prowadzącym do zmniejszania ich wielkości i masy:

$$\frac{dF_{bil}}{dt} = \frac{dF_{Co}}{dt} + \frac{dF_{vdW}}{dt} - \frac{dF_A}{dt} - \frac{dF_{od}}{dt} - \frac{dF_g}{dt} \quad (1)$$

Siła kulombowska (F_{Co}), przedstawiona w postaci zależności (2), odnosi się do siły, która pozwala na agregację cząstek pierwotnych, a w przypadku odpychania może spowodować zniszczenie kłaczków:

$$F_{Co} = k \frac{|q^+||q^-|}{r^2} \quad (2)$$

W równaniu (2) q^+ jest ładunkiem cząstki koagulantu (C), q^- jest ładunkiem cząstek zanieczyszczeń ulegających koagulacji/flokulacji (C), k jest współczynnikiem proporcjonalności tego układu ($N m^2/C^2$), a r jest odległością między cząstkami (m). Ładunek cząstek można wyrazić, biorąc pod uwagę przenikalność dielektryczną d_p , potencjał ζ cząstek oraz ich promień r_c zgodnie z równaniem:

$$q = \frac{d_p \zeta r_c}{k} \quad (3)$$

Zasadniczym elementem w równaniu (3) jest wartość potencjału ζ zależna m.in. od pH wody, co wykazano także w badaniach laboratoryjnych przedstawionych w pracy [8].

W celu maksymalizacji sił przyciągania pomiędzy cząstkami konieczne jest stworzenie warunków, które zapewnią uzyskanie cząstek zanieczyszczeń i cząstek powstałych w wyniku wprowadzenia chemicznych środków koagulujących o różnym ładunku pod względem znaku elektrycznego i wielkości.

Wartość r_c występującą we wzorze (3) można obliczyć zgodnie z równaniem (4), wykorzystując masę molową substancji M (g/mol), liczbę Avogadro N_A (mol^{-1}) i gęstość cząstek ρ (kg/m^3):

$$r_c = \frac{3M}{4\pi N_A \rho} \quad (4)$$

Siły van der Waalsa (F_{vdW}) mają niewielki zasięg oddziaływania, rzędu 10^{-9} m. Można je przedstawić zgodnie z równaniem (5), w którym A oznacza stałą Hamakera (J), zaś a to wielkość cząstki (m), a H oznacza odległość między cząstkami (m):

$$F_{vdW} = \pm \frac{A a}{12H^2} \quad (5)$$

Ponieważ wielkości sił van der Waalsa są bardzo trudne do określenia, więc w obliczeniach zastosowano wartości 10^{-8} i 10^{-9} N zgodnie z wynikami eksperymentów przeprowadzonych z użyciem mikroskopii atomowej [9].

Należy również wziąć pod uwagę odpychanie między cząstkami, które może być spowodowane przestrzennym rozmieszczeniem dipoli o prostym ładunku elektrycznym. Prawdopodobieństwo takiego rozmieszczenia elementów, w których występuje odpychanie, można określić na podstawie całkowitej liczby cząstek zanieczyszczeń i koagulantów w komorze flokulacji. Siły van der Waalsa mogą przyjąć ujemną wartość prowadzącą do zaburzenia agregacji kłaczków w przypadku odpychania.

Inne siły, które oddziałują na kłaczek (agregat) w postaci sił niszczących, to siła wyporu Archimedesesa (F_A), siła odśrodkowa (F_{od}) w systemie mieszania oraz siła grawitacji (F_g), co można zapisać w postaci zależności:

$$F_A = \frac{\rho_w g \Delta m_a}{\rho_a} \quad (6)$$

$$F_{od} = \frac{\Delta V^2 m_s}{\Delta r_d} \quad (7)$$

$$F_g = \Delta m_a g \quad (8)$$

w których ρ_w jest gęstością wody (kg/m^3), g to przyspieszenie ziemskie (m/s^2), Δm_a to zmiana masy agregatu w czasie (kg), ρ_a to gęstość agregatu (kg/m^3), ΔV to zmiana prędkości elementu prądu wody w określonym punkcie przestrzeni komory flokulacji (m/s), m_s jest masą mieszała (kg), a Δr_d to odległość między mieszałem a punktem symulacji (m).

Podstawowe równanie (1) zawiera zmienne w postaci masy kłaczków, prędkości strumienia wody i odległości pomiędzy mieszałem i punktem symulacji. Masa ulega zmianie w czasie przebiegu flokulacji, a prędkość wody zależy nie tylko od czasu, ale także od przestrzennego punktu modelowania (od punktu symulacji w przestrzeni 3D).

1.2. Algorytmy

1.2.1. Algorytm zmian masy agregatów

Główny algorytm ma charakter iteracyjny. Krok czasu iteracji zmienia się od 0 do wartości czasu flokulacji (dowolny czas mieszania). Konieczne jest również opisanie zmian masy, odległości i prędkości agregatów dla każdej iteracji. W tym celu utworzono podalgorytmy. Początkowa masa kłaczków jest równa masie jednej cząstki zanieczyszczenia w oczyszczanej wodzie. Masa kłaczków może wzrosnąć w wyniku przyciągania i łączenia cząstek (adhezji) w wodzie, a także w przypadku, gdy siły zewnętrzne działające na agregaty przekraczają wartość sił adhezji, co powoduje destrukcję cząstek, w wyniku czego masa kłaczków może się zmniejszyć. Głównym zagadnieniem jest określenie liczby cząstek ulegających przyłączeniu lub odłączeniu w jednej iteracji. Zwiększenie czasu w jednej iteracji jest równe 0,1 s, co pozwala zminimalizować liczbę cząstek łączących się lub odrywających w porównaniu z wynikami uzyskanymi podczas badań laboratoryjnych. Liczba cząstek biorących udział w interakcji dla 1 iteracji może być określona przez stopień neutralizacji (N_{neu}):

$$N_{\text{neu}} = \frac{|q^+|}{|q^-|} \quad (9)$$

Stopień neutralizacji N_{neu} przedstawia liczbę cząstek zanieczyszczeń, które mogą być połączone przez jedną cząstkę odczynnika koagulującego, a także pokazuje przyrost masy. Oznaczając nową liczbę cząstek tworzących agregat jako $N_{\text{nowe}}^{\text{agr}}$,

liczbę cząstek tworzących agregat w poprzedniej iteracji jako N_{poprz}^{agr} oraz masę nowego agregatu jako m_{nowe}^{agr} , a także masę agregatu z poprzedniej iteracji m_{poprz}^{agr} , można sformułować następujące równania:

$$\begin{aligned} N_{nowe}^{agr} &= N_{poprz}^{agr} + N_{neu} + 1 && \text{dla } F_{bil} \geq 0 \\ m_{nowe}^{agr} &= m_{poprz}^{agr} + N_{neu} m_{zan} + m_{koag} && \text{dla } F_{bil} \geq 0 \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} N_{nowe}^{agr} &= N_{poprz}^{agr} - N_{neu} - 1 && \text{dla } F_{bil} < 0 \\ m_{nowe}^{agr} &= m_{poprz}^{agr} - N_{neu} m_{zan} - m_{koag} && \text{dla } F_{bil} < 0 \end{aligned} \quad (11)$$

Niezbędne jest sprawdzenie wiarygodności uzyskanego rozmiaru agregatów. Możliwe jest porównanie długości mikroskali Kołmogorowa z uzyskaną wielkością kłaczków [10] w przypadku, gdy występuje przekroczenie wartości zniszczenia w mikroskali. Ta operacja może być wykonana na końcu całego algorytmu. Szybkość niszczenia określa się losowo.

1.2.2. Algorytm opisu punktu przestrzennego symulacji

Zróznicowana siła odśrodkowa działa na kłaczek, gdy przemieszcza się on w przestrzeni komory flokulacji. Wartość siły odśrodkowej zależy od prędkości strugi wody w punkcie symulacji i odległości tego punktu od osi mieszadła. Działanie tego algorytmu można podzielić na dwa zadania. Pierwszym z nich jest określenie prędkości w dowolnym punkcie przestrzeni w komorze flokulacji, a drugim jest symulacja ruchu kłaczków (agregatów) w komorze flokulacji. Wyznaczanie prędkości wody w dowolnym punkcie komory flokulacji można uzyskać na drodze rozwiązania równań Naviera-Stokesa dla tej komory [11].

Określenie punktu przestrzennego podczas modelowania jest rozwiązaniem pierwszego problemu. Punktem wyjścia do modelowania jest randomizacja. Definicja i punkt są zgodne z definicją ruchu kłaczków w przestrzeni. Przemieszczenie agregatu uzyskiwane jest dla przyrostu iteracyjnego $t(0,1 \text{ s})$:

$$S = Vt \quad (12)$$

Ponieważ przyrost iteracyjny jest bardzo małą wartością, prędkość (V) jest prędkością chwilową, która może być przyjmowana jako stała pomiędzy dwoma punktami w przestrzeni. Znając współrzędne bieżącego punktu i wartość przemieszczenia do następnego kroku symulacji, możliwe jest określenie współrzędnych następných punktów modelowania:

$$S = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2} \quad (13)$$

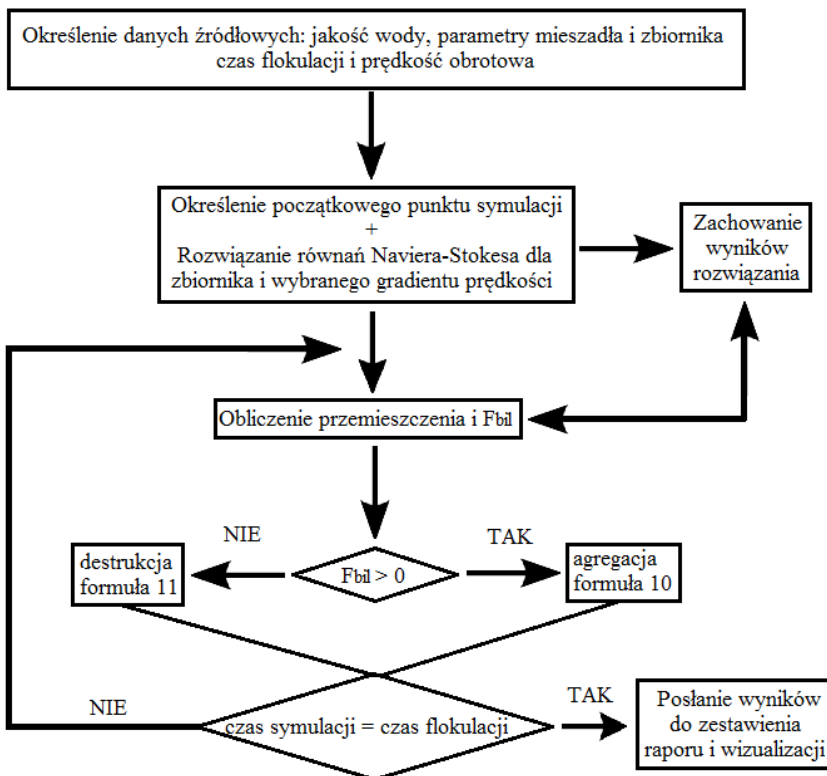
gdzie x_1, y_1, z_1 są współrzędnymi bieżącymi punktu symulacji, a x_2, y_2, z_2 określają współrzędne następnego punktu symulacji.

Wobec tego konieczne jest wybranie takich wartości x_2 , y_2 , z_2 , aby obliczyć wartość S według wzoru (13) w celu uzyskania tej samej wartości obliczonej zgodnie ze wzorem (12) i zachować eliptyczny kształt trajektorii ruchu.

1.2.3. Główny algorytm i algorytm wizualizacji

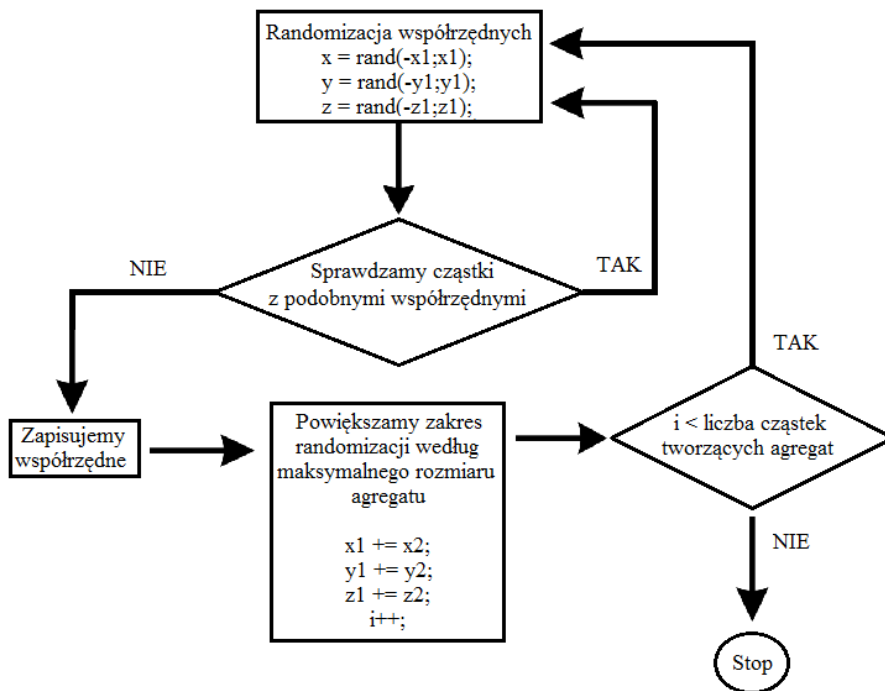
Na rysunku 1 przedstawiono połączenie wcześniej omówionych algorytmów w jeden główny algorytm. W wyniku działania algorytmu można uzyskać kompletne statystyki zawierające współrzędne przemieszczenia cząstek (agregatów) podczas każdej iteracji, masę i objętość agregatów, wielkość sił działających na agregat przy każdej iteracji, a także liczbę cząstek tworzących agregat.

Znając liczbę cząstek tworzących kłaczek, można dokonać wizualizacji. Wizualizacja może być realizowana przy użyciu randomizacji, ponieważ łączenie cząstek jest procesem całkowicie losowym i nie można go opisać żadnymi regułami. Algorytm wizualizacji przedstawiono na rysunku 2.



Rys. 1. Struktura głównego algorytmu symulacji procesu flokulacji

Fig. 1. The structure of the main algorithm of simulation of the flocculation process



i - zmienna umożliwiająca ustalenie liczby wykorzystanych cząstek

Rys. 2. Struktura algorytmu wizualizacji procesu flokulacji

Fig. 2. Structure of the flocculation process visualization algorithm

2. Materiały i metody

2.1. Przygotowanie programu komputerowego

Tłumaczenie zaproponowanych algorytmów zrealizowano z wykorzystaniem języka programowania C++, biblioteki graficznej OpenGL oraz biblioteki Qwt, która umożliwiła budowę wykresów.

W celu symulacji procesu flokulacji zastosowano następujące parametry wody: barwa 64,2 mg Pt/dm³, pH 7, potencjał ζ cząstek zanieczyszczeń - 0,014 V. Prędkość obrotowa mieszadła i czas flokulacji wynosiły odpowiednio 40 obr/min i 5 minut.

Zastosowane w symulacji parametry mieszadła były następujące: łopátka o kształcie prostokąta i promieniu 0,1 m i wysokości 0,1 m; odległość od mieszadła do dna zbiornika wynosiła 0,2 m. Przyjęto wymiary komory flokulacji: wysokość 0,5 m, średnica 0,4 m.

Jako koagulant zastosowano siarczan glinu (Al₂(SO₄)₃·18H₂O). Podczas analizy zastosowano potencjał ζ o wartości +0,043 V.

Wyniki symulacji uzyskane z wykorzystaniem zaproponowanego algorytmu skonfrontowano z wynikami badań laboratoryjnych.

2.2. Sposób prowadzenia badań laboratoryjnych i ich przebieg

Wodę modelową stanowiła woda wodociągowa zanieczyszczona roztworem kwasów humusowych. Roztwór kwasów humusowych uzyskano w wyniku ich ekstrakcji z torfu ogrodniczego w środowisku zasadowym. Dodanie wyciągu torfowego do wody wodociągowej w ilości $12,5 \text{ cm}^3/\text{dm}^3$ pozwoliło uzyskać wodę o barwie $64,2 \text{ mg Pt}/\text{dm}^3$ i mętności 2,14 NTU. Jakość wody wykorzystanej podczas badań odpowiadała jakości rzeczywistych wód powierzchniowych.

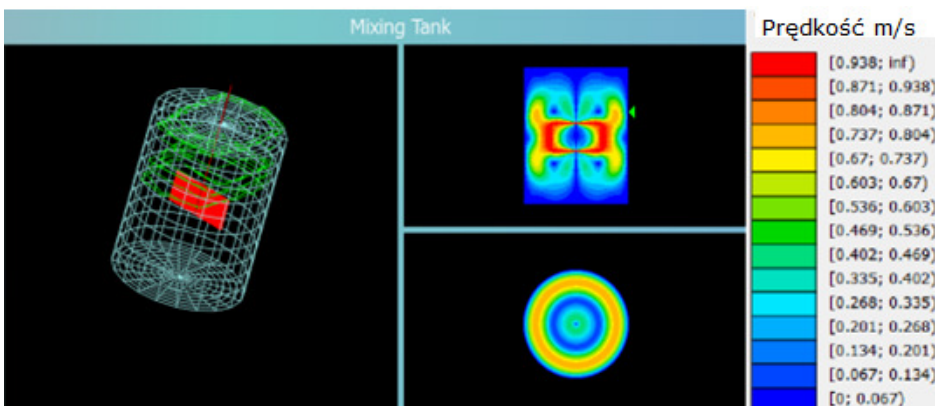
Jako koagulat zastosowano siarczan glinu ($\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 18\text{H}_2\text{O}$) o stężeniu 10%. pH doprowadzono do wartości $6,0 \pm 0,1$ przy użyciu roztworów HCl i NaOH. Dawka koagulantu została ustalona na podstawie badań wstępnych i wynosiła $40 \text{ mg}/\text{dm}^3$.

Podczas badań wykorzystano mieszadło wielostanowiskowe Velp Scientifica JLT-6 z mieszadłami łopatkowymi o wymiarach $75 \times 25 \text{ mm}$, naczynia reakcyjne w postaci zlewek polietylenowych miały wysokość 130 mm i średnicę 100 mm. Zastosowano szybkie mieszanie przez 1 minutę przy prędkości obrotowej mieszadła 100 obr/min, a następnie powolne mieszanie przez 10 minut przy prędkości obrotowej 10 obr/min.

Podczas badań morfologii powstałych agregatów (kłaczków) zastosowano komputerowy analizator obrazu mikroskopowego Morphologi G3 firmy Malvern. Układ pomiarowy analizatora obejmował automatyczny mikroskop oraz komputer z oprogramowaniem umożliwiającym zarządzanie pomiarami i analizę uzyskanych wyników.

3. Wyniki badań i dyskusja

Na rysunku 3 przedstawiono wyniki uzyskane podczas działania algorytmu z użyciem poprzednio zastosowanych parametrów. Pokazano na nim trajektorie ruchu kłaczków w ciągu 5 minut przy iteracyjnym kroku czasowym 0,1 sekundy, czyli 3000 iteracji.

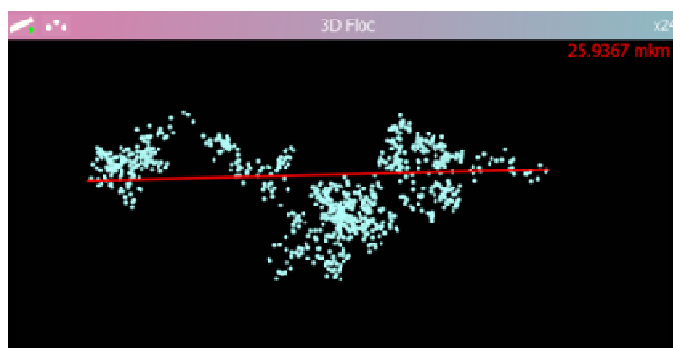


Rys. 3. Zrzuty ekranu przedstawiające przeprowadzoną symulację ruchu kłaczków

Fig. 3. Screen shots showing the simulated movement of flocs

Krzywa ruchu agregatu i działających sił została zbudowana i obliczona na podstawie danych uzyskanych z rozwiązania równań Naviera-Stokesa metodą SIMPLE (ang. *Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*).

W przykładzie przedstawionym na rysunku 4 kłaczek składa się z 859 cząstek, wśród których cząstki zanieczyszczeń stanowią 514 jednostek, a liczba cząstek koagulantu wynosi 339. Kłaczek ma stosunkowo dużą wielkość, bo jego długość wynosi 25,94 μm .

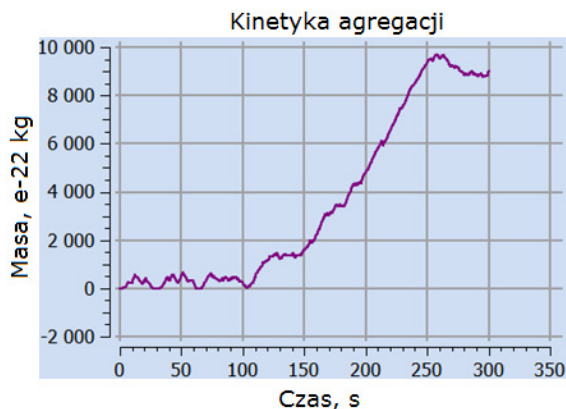


Rys. 4. Zrzut ekranu przedstawiający agregat (853 cząstek) i pomiar jego długości

Fig. 4. Screenshot showing the aggregate (853 particles) and its length measurement

Istnieje również możliwość zebrania danych o każdej iteracji do dalszej analizy wybranych parametrów flokulacji. Taki rodzaj dostępnego raportu pokazano na rysunku 5. Rysunek ten przedstawia wpływ warunków mieszania na powstawanie agregatów (kłaczków) w czasie flokulacji.

Analizując trajektorię ruchu kłaczków, można zauważyć, że niszczenie kłaczków następuje głównie w obszarze w pobliżu łopatek mieszadła, gdzie woda ma największą prędkość, zgodnie z danymi uzyskanymi z równań Naviera-Stokesa.

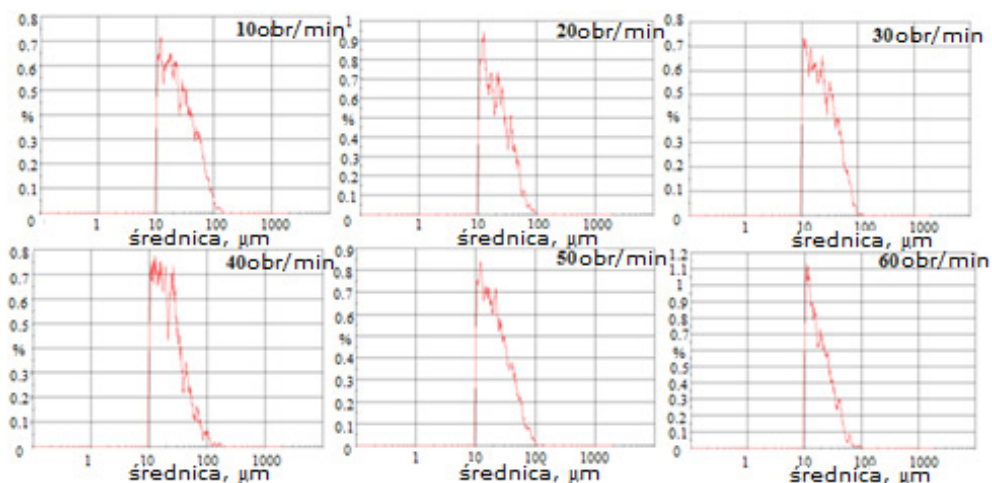


Rys. 5. Zrzut ekranu przedstawiający kinetykę powstawania kłaczków

Fig. 5. Screenshot showing the kinetics of floc formation

Rozkład wielkości agregatów uzyskany podczas badań laboratoryjnych z użyciem analizatora obrazu Morphology G3 był podobny do rozkładu uzyskanego w wyniku szeregu symulacji komputerowych. Na rysunku 6 pokazano, że zwiększenie prędkości mieszadła prowadzi do większego oddziaływania sił niszczących, a w rezultacie pojawiania się w układzie kłaczków o małych rozmiarach. Uzyskano również podobieństwo modelu do tego zjawiska.

Opracowany model wykazał również, że proces koagulacji/flokulacji może przebiegać niezadowalająco, gdy pH przyjmuje wartości poniżej 5 lub powyżej 9. Dzieje się tak z powodu zbliżonej wartości i znaku potencjału ζ cząstek zanieczyszczeń i koagulantu, co prowadzi do odpychania cząstek.



Rys. 6. Wpływ prędkości obrotowej mieszadła na rozkład wielkości agregatów (pomiarzy wykonane z użyciem analizatora Morphologi G3)

Fig. 6. Effect of mixing velocity on the aggregate size distribution (measurements carried out using Morphologi G3 analyzer)

Mechanizmy i wyniki działania proponowanego modelu zostały porównane z mechanizmami i wynikami działania modeli autorów [5, 6]. Tak na przykład w modelu przedstawionym w pracy [5] wykorzystywana jest teoria Smoluchowskiego, mianowicie łączenie predefiniowanej liczby cząstek w agregaty składające się z dwóch, trzech, czterech, n -cząstek. Ograniczenie rozmiarów powstającego agregatu realizowane jest przez predefiniowaną liczbę k . W wyniku działania tego modelu można obserwować zwiększanie rozmiarów agregatu w czasie i wizualizować wyniki symulacji. Wyniki wizualizacji zaprezentowane przez autorów pracy [5] opierają się na teorii fraktali i przedstawione są w 2D, co jest dużym uproszczeniem i pociąga za sobą błąd określenia realnej wielkości agregatu, ponieważ rozmiary agregatu w rzeczywistości zmieniają się w przestrzeni 3D. Również model w pracy [5] nie uwzględnia sił działających podczas agregacji cząstek, a mianowicie sił oddziałujących na agregat, wpływu warunków turbulentnych

i destrukcji agregatu podczas symulacji. Model zaproponowany przez autorów pracy [6] opiera się także na teorii Smoluchowskiego, ale uwzględnia również mechanizmy interakcji pomiędzy cząstkami proponowane w teorii DLVO, co jest jego dużą zaletą. Wyniki wizualizacji powstających agregatów przedstawione w [6] przypominają bardziej agregaty, które można zobaczyć podczas analizy mikroskopowej niż w modelu [5]. Ale również model pochodzący z pracy [6] ma wady, ponieważ predefiniowana jest liczba cząstek biorących udział w tworzeniu kłaczków. Również słabo są uwzględnione zjawiska destrukcji agregatu podczas symulacji i wpływ dynamiki cieczy na proces. Proponowany model w porównaniu z modelami prezentowanymi w [5, 6] zawiera wszystkie założenia wykorzystane w powyższych modelach, wobec czego pozwala uwzględnić wpływ jakości wody surowej na przebieg procesu (z uwagi na uwzględnienie rodzaju zanieczyszczenia i jego potencjału ζ uzależnionego od pH środowiska), wpływ wybranej dawki koagulantu, wpływ wybranych parametrów mieszania i geometrii reaktora (czas i intensywność mieszania, rozmiary reaktora i mieszadła). Zastosowanie obliczeniowej dynamiki cieczy (CFD) w proponowanym modelu pozwala uwzględnić przemieszczenie agregatu w trakcie symulacji i określić przypadki destrukcji za pomocą mikroskali Kołmogorowa. Wizualizacja wyników przedstawiona w autorskich symulacjach komputerowych jest bardzo podobna do sylwetki agregatów przedstawionych w komputerowych symulacjach [6] i do sylwetki agregatów zaprezentowanych w badaniach laboratoryjnych [5].

Kolejnym krokiem w rozwoju proponowanego algorytmu jest wprowadzenie funkcji, która pozwala określić optymalną dawkę koagulantu przy danych parametrach chemicznych wody. Możliwa jest również modyfikacja algorytmu, aby symulować nie tylko tworzenie pojedynczych kłaczków, ale także symulować rozkład kłaczków w określonej objętości wody.

Wnioski

1. Proponowany algorytm pozwala na określenie wielkości kłaczków, objętości, masy i ich wytrzymałości. Wartość siły decydującej o skuteczności flokulacji jest głównym parametrem, ponieważ efekt oczyszczania uzyskiwany w procesie separacji jest w pełni zależny od wytrzymałości kłaczków.
2. Zaproponowany algorytm pozwolił na przeprowadzenie modelowania możliwego kształtu kłaczków. Pozwolił także na wizualizację wyników symulacji w przestrzeni 3D przy zastosowaniu różnych parametrów koagulacji/flokulacji.
3. Zaproponowany algorytm i przygotowany program komputerowy pozwolił na określenie optymalnych parametrów, takich jak parametry zbiornika, parametry mieszadła, parametry mieszania, pH do przeprowadzenia koagulacji.
4. Wielokrotna symulacja zgodna z teorią szybkiej koagulacji Smoluchowskiego pozwoliła uzyskać pewną liczbę kłaczków, które mogą pojawić się w układzie, a także umożliwiła określenie parametrów wszystkich powstających kłaczków.

Literatura

- [1] Derjaguin B., A theory of interaction of particles in presence of electric double layers and the stability of lyophobic colloids and disperse systems, *Progress in Surface Science* 1993, 43,1-14.
- [2] Boinovich L., DLVO forces in thin liquid films beyond the conventional DLVO theory, *Current Opinion in Colloid & Interface Science* 2010, 15, 297-302.
- [3] Kusters K.A., Wijers J.G., Thoenes D., Aggregation kinetics of small particles in agitated vessels, *Chemical Engineering Science* 1997, 52, 1, 107-121.
- [4] Thomas D.N., Judd S.J., Fawcett N., Flocculation modelling: A review, *Wat. Res.* 1999, 33, 1579-1592.
- [5] He W., Nan J., Song J., Song X., Application of Numerical Simulation to Investigate Fractal Structure of Floc Formed in Flocculation Process of Water Treatment, *International Conference on Energy and Environment Technology* 2009, 441-445.
- [6] Torres F.E., Russel W.B., Schowalter W.R., Simulations of coagulation in viscous flows, *J. Colloid and Interface Science* 1991, 145, 51-73.
- [7] Wardzyńska R., Smoczyński L., Wolicki R., Załęska-Chróst B., Bukowski Z., Computer simulation of flocculation and chemical coagulation, *Ecological Chemistry and Engineering* 2010, 17, 12, 1663-1672.
- [8] Jarvis P., Jefferson B., Gregory J., Parsons S.A., A review of floc strength and breakage, *Wat. Res.* 2005, 39, 14, 3121-13127.
- [9] Сорокина И.Д., Дресвянников А.Ф., Петрова Е.В., Камалиева А.Р., Определение дзета-потенциала систем на основе Fe(II), Fe(III), Al(III), SO_4^{2-} , Cl^- - H_2O - OH^- и оценка его влияния на процесс коагуляции, Казань 2015.
- [10] Leite F.L., Bueno C.C., Da Róz A.L., Ziemath E.C., Oliveira Jr. O.N., Theoretical models for surface forces and adhesion and their measurement using atomic force microscopy, *Int. J. Mol. Sci.* 2012, 13, 12773-12856.
- [11] Hiraoka S., Yamada I., Aragaki T., Nishuki H., Sato A., Takagi T., Numerical analysis of three dimensional velocity profile of highly viscous newtonian fluid in an agitated vessel with paddle impeller, *Journal of Chemical Engineering of Japan* 1988, 21, 1, 79-86.

Lodz University of Technology, Faculty of Civil Engineering,
Architecture and Environmental Engineering
al. Politechniki 6, 90-924 Łódź, Poland
e-mail: andrzej.jodlowski@p.lodz.pl

Streszczenie

Głównym celem artykułu jest analiza czynników fizycznych i chemicznych wpływających na strukturę i wytrzymałość agregatów powstających podczas koagulacji i flokulacji domieszek wody w aspekcie komputerowej symulacji procesu. Zaproponowane zależności matematyczne wykorzystano do komputerowego modelowania procesu oraz wizualizacji uzyskanych wyników. Wyniki działania i wizualizacji algorytmów przedstawiono w formie graficznej. W celu sprawdzenia poprawności proponowanego algorytmu przeprowadzono badania laboratoryjne.

Słowa kluczowe: koagulacja/flokulacja, symulacja agregacji cząstek, dynamika mieszania cieczy