Математическое моделирование процессов самоочищения реки с использованием модификации моделей Герберта и Стритера – Фелпса

Д.Г. Абеляшев, М.Д. Михайлов

Томский государственный университет, Томск

Проводится численное исследование модификации моделей Герберта и Стритера – Фелпса, переменными которых служат концентрация органического вещества L (в единицах БПК), концентрации микроорганизмов X и кислорода D.

Поступающие в водоем загрязнения вызывают в нем нарушение естественного равновесия. Способность водоема противостоять этому нарушению, освобождаться от вносимых загрязнений и составляет сущность процесса самоочищения, представляющего собой сложный комплекс физических, физико-химических, химических и биохимических явлений. Главную роль в окислении растворенных органических веществ играют бактерии. При этом видовой состав микроорганизмов определяется характером внесенных загрязнений. В воде развиваются виды, способные использовать те или иные загрязняющие вещества в качестве источников питания.

Вопросы описания роста микробных популяций давно привлекают внимание ученых. В конце 40-х годов 20-го столетия французский учёный Жак Моно обнаружил и обосновал связь между скоростью роста микроорганизмов и концентрацией лимитирующего субстрата в среде [1]. После этих исследований работы по моделированию роста культур микроорганизмов получили достаточно широкое распространение.

Приведём одну из модификаций модели Моно – модель Герберта – замкнутую систему кинетических уравнений, описывающих рост биомассы X на лимитирующем субстрате L [2]:

$$\begin{cases} \dfrac{dL}{dt} = -\dfrac{1}{Y}\mu(L)\,X, \\ \dfrac{dX}{dt} = \mu(L)\,X - b\,X, \\ L(0) = L_0\,, X(0) = X_0\,. \end{cases} \qquad (1)$$

Здесь $\mu(L) = \dfrac{\mu_m L}{K_L + L}$, b – константа скорости отмирания бактерий; μ_m – максимальная удельная скорость роста микроорганизмов, сут$^{-1}$; K_L – константа полунасыщения, равная концентрации субстрата L, при которой скорость процесса равна половине удельной максимальной, мг/л; Y – экономический коэффициент, показывающий, какая часть поглощенного субстрата идет на построение биомассы бактерий. Здесь при $b = 0$ система уравнений (1) представляет собой классическую модель Моно.

Ещё одной важной характеристикой для водных экосистем является содержание в воде растворенного кислорода. Даже небольшие изменения его концентрации в воде могут приводить к необратимым последствиям для всей экосистемы [3].

Рассмотрим кислородный баланс реки в условиях ее загрязнения легко окисляемыми отходами, например, органического происхождения. При попадании таких отходов в воду начинается процесс их биохимического разложения, который протекает с использованием растворенного в воде кислорода, что может привести к падению его концентрации в воде.

Исследуем взаимосвязь между концентрациями растворенного кислорода и органических отходов. Концентрация отходов измеряется величиной так называемого биохимического потребления кислорода (БПК), которая представляет собой количество кислорода на единицу объема воды, необходимое для разложения содержащихся в этом объеме органических примесей. Единица измерения БПК – мг/л O_2.

Опишем процессы, формирующие кислородный баланс реки при наличии загрязнения. Введем обозначения:

L – биохимическое потребление кислорода (БПК), мг/л, D_s – концентрация кислорода в воде при отсутствии отходов, мг/л, D –

концентрация кислорода в воде при наличии отходов, мг/л, K_1 – скорость потребления кислорода на разложение отходов, 1/сутки, K_2 – скорость реаэрации, 1/сутки.

В этих обозначениях процессы разложения отходов и формирования кислородного баланса в водоеме описываются следующими простыми уравнениями, получившими название модели Стритера – Фелпса, по именам ученых, впервые использовавших их для анализа такой ситуации:

$$\begin{cases} \dfrac{dL}{dt} = -K_1 L, \\ \dfrac{dD}{dt} = -K_1 L + K_2 \cdot \left(D_s - D\right), \\ L\left(0\right) = L_0, D\left(0\right) = D_S. \end{cases} \tag{2}$$

Скорость разложения отходов пропорциональна их концентрации в воде при условии, что кислорода достаточно для их полного разложения. При отсутствии отходов концентрация кислорода в воде колеблется около равновесного (максимального для данных условий) значения. При наличии отходов реальная концентрация кислорода будет снижаться. Однако существуют процессы, обеспечивающие увеличение концентрации кислорода в воде, например реаэрация – растворение кислорода атмосферы в воде через поверхностный слой.

Для учёта обоих характеристик будем использовать модель, полученную путём объединения двух приведённых выше моделей:

$$\begin{cases} \dfrac{dL}{dt} = -\dfrac{1}{Y}\dfrac{\mu_m X L}{K_L + L} - K_1 L, \\ \dfrac{dX}{dt} = \dfrac{\mu_m X L}{K_L + L} - b X, \\ \dfrac{dD}{dt} = -K_1 L + K_2 \left(D_s - D\right), \\ L(0) = L_0,\ X(0) = X_0,\ D(0) = D_0,\ t \in \left[0, T\right]. \end{cases} \tag{3}$$

Модификация построенной модели (3) на двумерный случай заключается в добавлении в данную систему оператора диффузии

$$\Gamma = d_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + d_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

и конвективного оператора

$$\Delta = V_1 \frac{\partial}{\partial x} + V_2 \frac{\partial}{\partial y}.$$

В результате модель принимает вид системы дифференциальных уравнений в частных производных

$$\begin{cases} \dfrac{\partial L}{\partial t} + V_1 \dfrac{\partial L}{\partial x} + V_2 \dfrac{\partial L}{\partial y} = d_1 \dfrac{\partial^2 L}{\partial x^2} + d_2 \dfrac{\partial^2 L}{\partial y^2} - \dfrac{1}{Y} \dfrac{\mu_m X L}{K_L + L} - K_1 L, \\ \dfrac{\partial X}{\partial t} + V_1 \dfrac{\partial X}{\partial x} + V_2 \dfrac{\partial X}{\partial y} = d_1 \dfrac{\partial^2 X}{\partial x^2} + d_2 \dfrac{\partial^2 X}{\partial y^2} + \dfrac{\mu_m X L}{K_L + L} - b X, \\ \dfrac{\partial D}{\partial t} + V_1 \dfrac{\partial D}{\partial x} + V_2 \dfrac{\partial D}{\partial y} = d_1 \dfrac{\partial^2 D}{\partial x^2} + d_2 \dfrac{\partial^2 D}{\partial y^2} - K_1 L + K_2 (D_S - D) \end{cases} \quad (4)$$

с соответствующими начальными

$$\begin{aligned} L(x, y, 0) &= L_0(x, y), \\ X(x, y, 0) &= X_0(x, y), \\ D(x, y, 0) &= D_0(x, y) \end{aligned} \quad (5)$$

и граничными

$$\begin{aligned} &\left.\frac{\partial L}{\partial x}\right|_{x=a} = \left.\frac{\partial L}{\partial x}\right|_{x=b} = 0, \ \left.\frac{\partial L}{\partial y}\right|_{y=c} = \left.\frac{\partial L}{\partial y}\right|_{y=d} = 0, \\ &\left.\frac{\partial X}{\partial x}\right|_{x=a} = \left.\frac{\partial X}{\partial x}\right|_{x=b} = 0, \ \left.\frac{\partial X}{\partial y}\right|_{y=c} = \left.\frac{\partial X}{\partial y}\right|_{y=d} = 0, \\ &\left.\frac{\partial D}{\partial x}\right|_{x=a} = \left.\frac{\partial D}{\partial x}\right|_{x=b} = 0, \ \left.\frac{\partial D}{\partial y}\right|_{y=c} = \left.\frac{\partial D}{\partial y}\right|_{y=d} = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

условиями, где V_1, V_2 – компоненты вектора скорости течения реки, км/сут; d_1, d_2 – коэффициенты диффузии.

Численная реализация модели (4) – (6) осуществляется с помощью явной разностной схемы вида:

$$\begin{cases}
\dfrac{L_{j,k}^{n+1}-L_{j,k}^{n}}{\tau}+V_1\dfrac{L_{j,k}^{n}-L_{j-1,k}^{n}}{h_x}+V_2\dfrac{L_{j,k}^{n}-L_{j,k-1}^{n}}{h_y}=d_1\dfrac{L_{j+1,k}^{n}-2L_{j,k}^{n}+L_{j-1,k}^{n}}{h_x^{\,2}}+\\
+d_2\dfrac{L_{j,k+1}^{n}-2L_{j,k}^{n}+L_{j,k-1}^{n}}{h_y^{\,2}}-\dfrac{1}{Y}\dfrac{\mu_m\,L_{j,k}^{n}X_{j,k}^{n}}{K_L+L_{j,k}^{n}}-K_1L_{j,k}^{n},\\
\dfrac{X_{j,k}^{n+1}-X_{j,k}^{n}}{\tau}+V_1\dfrac{X_{j,k}^{n}-X_{j-1,k}^{n}}{h_x}+V_2\dfrac{X_{j,k}^{n}-X_{j,k-1}^{n}}{h_y}=d_1\dfrac{X_{j+1,k}^{n}-2X_{j,k}^{n}+X_{j-1,k}^{n}}{h_x^{\,2}}+\\
+d_2\dfrac{X_{j,k+1}^{n}-2X_{j,k}^{n}+X_{j,k-1}^{n}}{h_y^{\,2}}+\dfrac{\mu_m\,L_{j,k}^{n}X_{j,k}^{n}}{K_L+L_{j,k}^{n}}-bX_{j,k}^{n},\\
\dfrac{D_{j,k}^{n+1}-D_{j,k}^{n}}{\tau}+V_1\dfrac{D_{j,k}^{n}-D_{j-1,k}^{n}}{h_x}+V_2\dfrac{D_{j,k}^{n}-D_{j,k-1}^{n}}{h_y}=d_1\dfrac{D_{j+1,k}^{n}-2D_{j,k}^{n}+D_{j-1,k}^{n}}{h_x^{\,2}}+\\
+d_2\dfrac{D_{j,k+1}^{n}-2D_{j,k}^{n}+D_{j,k-1}^{n}}{h_y^{\,2}}-K_1L_{j,k}^{n}+K_2\cdot\left(D_s-D_{j,k}^{n}\right),\\
j=\overline{1,N_1-1},\ k=\overline{1,N_2-1},\ n=\overline{0,M-1},
\end{cases}$$

с начальными и граничными условиями следующего вида:

$$L_{j,k}^{0}=L^{0}\left(x_j,y_k\right),\ X_{j,k}^{0}=X^{0}\left(x_j,y_k\right),\ D_{j,k}^{0}=D^{0}\left(x_j,y_k\right);$$

$$L_{0,k}^{n}=L_{1,k}^{n},\ L_{N_1,k}^{n}=L_{N_1-1,k}^{n},\ L_{j,0}^{n}=L_{j,1}^{n},\ L_{j,N_2}^{n}=L_{j,N_2-1}^{n},$$

$$X_{0,k}^{n}=X_{1,k}^{n},\ X_{N_1,k}^{n}=X_{N_1-1,k}^{n},\ X_{j,0}^{n}=X_{j,1}^{n},\ X_{j,N_2}^{n}=X_{j,N_2-1}^{n},$$

$$D_{0,k}^{n}=D_{1,k}^{n},\ D_{N_1,k}^{n}=D_{N_1-1,k}^{n},\ D_{j,0}^{n}=D_{j,1}^{n},\ D_{j,N_2}^{n}=D_{j,N_2-1}^{n},$$

$$j=\overline{0,N_1},\ k=\overline{0,N_2},\ n=\overline{1,M}.$$

Разностная схема в линейном приближении исследовалась на устойчивость методом гармоник по начальным данным. В ходе

исследований было показано, что она является условно устойчивой, если $\tau \le 1/\left(\frac{V_1}{h_x}+\frac{V_2}{h_y}+2\frac{d_1}{h_x^2}+2\frac{d_2}{h_y^2}\right)$.

Кроме того, показано, что разностная схема аппроксимирует исходную дифференциальную задачу с первым порядком относительно шагов по пространству h_x, h_y и шагом по времени τ в норме пространства C_h. Из этого следует, что решение разностной задачи сходится к решению дифференциальной задачи (4) – (6).

Численная реализация данной задачи проводилась на ПЭВМ. Для этого была написана программа на языке С. При построении графиков использовался пакет MatLab.

Объектом исследования являлся участок реки Селенги от г. Улан-Уде до Кабанска длиной 50 км и шириной 600 м. В начальный момент область загрязнения составляла 10 км в длину и 60 м в ширину и его концентрация равнялась 9,7 мг/л. На всей площади реки концентрация кислорода составляла 8 мг/л, а концентрация микроорганизмов – 1,2 мг/л. Расчётная область покрывалась сеткой 100×100 точек.

На рис. 1 представлен график концентрации органического вещества L в момент времени $t = 5 сут$. К этому моменту времени загрязнитель распространился на всю расчётную область и максимальное его значение равнялось 0,1895 мг/л, что значительно меньше первоначального загрязнения.

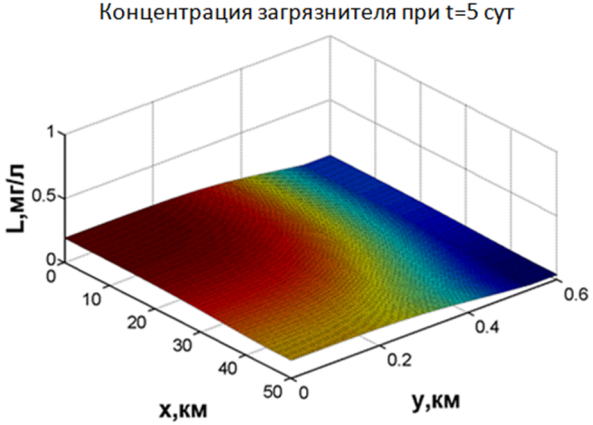


Рис. 1

Процесс очищения водной среды происходит путём окисления органического вещества как с помощью кислорода, так и с помощью бактерий.

При попадании загрязнителя в водную среду происходит его окисление содержащимся в воде кислородом, тем самым его концентрация падает. На рис. 2 представлен график концентрации кислорода D на 5-е сутки. Из графика видно, что в области с большей концентрацией загрязнения значение концентрации кислорода меньше, чем в области с меньшим загрязнением. Одновременно с кислородом органическое вещество окисляется и бактериями.

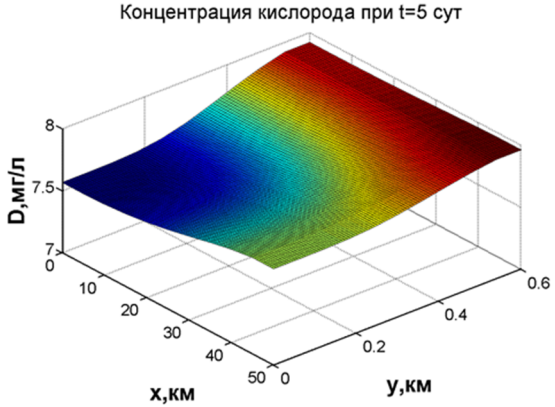


Рис. 2

На рис. 3 представлено распределение их концентрации на всём протяжении реки в тот же момент времени. Из графика видно, что концентрация микроорганизмов больше там, где больше концентрация загрязнения.

К 10-м суткам загрязнение распространяется на всю расчётную область, и к этому моменту времени достигается его предельно допустимая концентрация (ПДК). Концентрация кислорода при отсутствии отходов начнёт восстанавливаться, начиная с момента 2,7 сут, до своего первоначального равновесного состояния 8 мг/л.

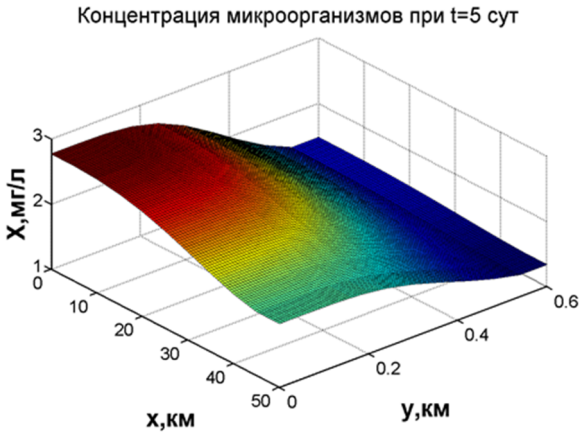


Рис. 3

К моменту времени 7,7 сут количество бактерий достигает своего максимума – 2,78 мг/л, а дальше наблюдается сокращение популяции бактерий, которая в дальнейшем установится на некотором постоянном уровне. Достоверность полученных результатов была подтверждена сравнением с экспериментальными данными из [4].

Литература

1. *Иерусалимский Н.Д.* Основы физиологии микробов. М. : Изд. АН СССР, 1963. 242 с.

2. *Хубларян М.Г.* Водные потоки: модели течений и качества суши. М. : Наука, 1991. 192 с.

3. *Вавилин В.А.* Нелинейные модели биологической очистки и процессов самоочищения в реках. М. : Наука, 1981. 160 с.

4. *Фундаментальные* проблемы воды и водных ресурсов // Материалы Третьей всероссийской конференции с международным участием. Введ. 2010-08-24. Барнаул : Изд-во АРТ, 2010. С.14–17.