

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Механико-математический факультет

**Всероссийская молодежная научная конференция
студентов, аспирантов и молодых ученых
«Все грани математики и механики»**

(23–27 апреля 2019 г.)

Сборник статей

Под редакцией
д-ра физ.-мат. наук, профессора А.В. Старченко

Томск
Издательский Дом Томского государственного университета
2019

Математическое моделирование и численное исследование процесса самоочищения речного водоема

Давыдов А. С., Михайлов М.Д.

Томский государственный университет, Томск

e-mail: afoniashka@gmail.com

Аннотация. Рассматривается течение невязкой несжимаемой жидкости на прямоугольном участке канала с гладким дном. Предлагается математическая модель, представляющая собой модификацию моделей Моно [1], Стритера-Фелпса [2,3], Доббинса и Кемпа [4]. Численно исследуется процесс самоочищения на загрязненном участке реки с помощью указанной модели. В качестве разностных методов используются: явная разностная схема и метод конечных объемов. Показано, что схемы аппроксимирует с первым порядком по времени и пространству исходную дифференциальную задачу, условно устойчивы и имеет место сходимост [5]. Приводятся и анализируются результаты численных расчетов.

Ключевые слова: математическая модель, разностная схема, погрешность аппроксимации, устойчивость, сходимост, субстрат, микроорганизмы, дефицит кислорода, метод конечных объемов.

Физическая и математическая постановка задачи.

Течение реки моделируется каналом, имеющим форму, указанную на рис. 1.

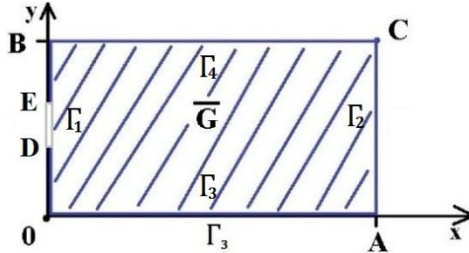


Рис. 1. Расчетная область \bar{G}

По каналу течет жидкость. Параметры, характеризующие течение жидкости и процесс самоочищения, будем считать зависящими от x, y, t . Указанный процесс описывается модификацией моделей Моно, Стритера-Фелпса, Доббинса и Кемпа, которая в области

$$\bar{G} = G \cup \Gamma; \quad G = \{ (x, y) \mid 0 < x < A; \quad 0 < y < B \}; \quad t \in [0, T];$$

$$\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4; \quad \Gamma_1 = \Gamma_1^{(1)} \cup \Gamma_1^{(2)} \cup \Gamma_1^{(3)}, \quad \text{где}$$

$$\Gamma_1^{(1)} = \{ (x, y) \mid x = 0; \quad 0 \leq y < D \}; \quad \Gamma_1^{(2)} = \{ (x, y) \mid x = 0; \quad D \leq y \leq E \};$$

$$\Gamma_1^{(3)} = \{ (x, y) \mid x = 0; \quad E < y \leq B \}; \quad \Gamma_2 = \{ (x, y) \mid x = A; \quad A \leq y \leq C \};$$

$$\Gamma_3 = \{ (x, y) \mid 0 \leq x \leq A; \quad y = 0 \}; \quad \Gamma_4 = \{ (x, y) \mid B \leq x \leq C; \quad y = B \}$$

представляет собой начально- краевую задачу следующего вида:

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial t} + U \frac{\partial L}{\partial x} + V \frac{\partial L}{\partial y} = -K_1 L - K_3 L - \frac{\mu_{\max} X L}{Y(K_L + L)} + J_B + D_f \left(\frac{\partial^2 L}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 L}{\partial y^2} \right); \\ \frac{\partial X}{\partial t} + U \frac{\partial X}{\partial x} + V \frac{\partial X}{\partial y} = \frac{\mu_{\max} X L}{K_L + L} + D_f \left(\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 X}{\partial y^2} \right); \\ \frac{\partial D}{\partial t} + U \frac{\partial D}{\partial x} + V \frac{\partial D}{\partial y} = K_1 L - K_2 D - \frac{\mu_{\max} X L}{K_L + L} + J_1 + J_2 - J_3 + D_f \left(\frac{\partial^2 D}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 D}{\partial y^2} \right); \end{cases} \quad (1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l}
 L(x, y, 0) = 0; X(x, y, 0) = 1; D(x, y, 0) = 0; (x, y) \in \bar{G}; \\
 L(0, y, t) = \begin{cases} \varphi(y) & , y \in \Gamma_1^{(2)} \\ 0, & y \in \Gamma_1^{(1)} \cup \Gamma_1^{(3)} \end{cases} \text{ для } 0 < t < 2; \\
 L(0, y, t) = 0, y \in \Gamma_1; 2 \leq t \leq T; \\
 X(0, y, t) = 1; D(0, y, t) = 0; y \in \Gamma_1; 0 < t \leq T; \\
 \frac{\partial L(A, y, t)}{\partial x} = 0; \frac{\partial X(A, y, t)}{\partial x} = 0; \frac{\partial D(A, y, t)}{\partial x} = 0; y \in \Gamma_2; 0 < t \leq T; \\
 \frac{\partial L(x, 0, t)}{\partial y} = 0; \frac{\partial X(x, 0, t)}{\partial y} = 0; \frac{\partial D(x, 0, t)}{\partial y} = 0; x \in \Gamma_3; 0 < t \leq T; \\
 \frac{\partial L(x, B, t)}{\partial y} = 0; \frac{\partial X(x, B, t)}{\partial y} = 0; \frac{\partial D(x, B, t)}{\partial y} = 0; x \in \Gamma_4; 0 < t \leq T;
 \end{array} \right. \quad ($$

2)

где U, V - компоненты вектора скорости течения реки, L - концентрация органического вещества, X - биомасса микроорганизмов, D - дефицит кислорода, K_1 - константа окислительной трансформации органического вещества, K_2 - коэффициент реэрации, K_3 - константа скорости удаления органического вещества путем осаждения на дно, J_1 – скорость убыли кислорода за счет разложения придонных иловых отложений, J_2 – скорость уменьшения растворенного кислорода вследствие дыхания растений, J_3 – скорость поступления кислорода из-за фотосинтеза, J_B – поток органических веществ, вымываемых из донных отложений, μ_{max} – максимальная удельная скорость роста микроорганизмов, K_L - константа полунасыщения, Y – коэффициент трансформации субстрата в биомассу, D_f - коэффициент диффузии.

Описание численных методов. Вначале рассмотрим явный разностный метод. Для этого покроем область \bar{G} сеткой с равноотстоящими узлами по пространственным переменным x, y следующего вида:

$$\bar{\omega}_{\tau h} = \omega_{\tau} \times \bar{\omega}_n, \text{ где } \omega_{\tau} = \{t_n | t_n = n\tau, n = \overline{0, M}\};$$

$$\bar{\omega}_h = \{(x_j, y_k) | x_j = jh_x, y_k = kh_y, j = \overline{0, N_x}, k = \overline{0, N_y}\},$$

где τ – шаг по времени, h_x, h_y – пространственные шаги.

Аппроксимируем дифференциальную задачу (1),(2) явной разностной схемой вида:

$$(3) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{L_{j,k}^{n+1} - L_{j,k}^n}{\tau} + U \frac{L_{j,k}^n - L_{j-1,k}^n}{h_x} + V \frac{L_{j,k}^n - L_{j,k-1}^n}{h_y} = -K_1 L_{j,k}^n - K_3 L_{j,k}^n - \\ - \frac{\mu \max X_{j,k}^n L_{j,k}^n}{Y(K_L + L_{j,k}^n)} + J_B + D_f \left(\frac{L_{j+1,k}^n - 2L_{j,k}^n + L_{j-1,k}^n}{h_x^2} + \frac{L_{j,k+1}^n - 2L_{j,k}^n + L_{j,k-1}^n}{h_y^2} \right); \\ \frac{X_{j,k}^{n+1} - X_{j,k}^n}{\tau} + U \frac{X_{j,k}^n - X_{j-1,k}^n}{h_x} + V \frac{X_{j,k}^n - X_{j,k-1}^n}{h_y} = \frac{\mu \max X_{j,k}^n L_{j,k}^n}{K_L + L_{j,k}^n} + \\ + D_f \left(\frac{X_{j+1,k}^n - 2X_{j,k}^n + X_{j-1,k}^n}{h_x^2} + \frac{X_{j,k+1}^n - 2X_{j,k}^n + X_{j,k-1}^n}{h_y^2} \right); \\ \frac{D_{j,k}^{n+1} - D_{j,k}^n}{\tau} + U \frac{D_{j,k}^n - D_{j-1,k}^n}{h_x} + V \frac{D_{j,k}^n - D_{j,k-1}^n}{h_y} = K_1 L_{j,k}^n - K_2 D_{j,k}^n + J_1 + J_2 - \\ - \frac{\mu \max X_{j,k}^n L_{j,k}^n}{K_L + L_{j,k}^n} - J_3 + D_f \left(\frac{D_{j+1,k}^n - 2D_{j,k}^n + D_{j-1,k}^n}{h_x^2} + \frac{D_{j,k+1}^n - 2D_{j,k}^n + D_{j,k-1}^n}{h_y^2} \right) \end{array} \right.$$

с соответствующими начальными:

$$(4) \quad L_{j,k}^0 = 0; \quad X_{j,k}^0 = 1; \quad D_{j,k}^0 = 0; \quad j = \overline{0, N_x}; \quad k = \overline{0, N_y}$$

и граничными условиями:

$$\begin{aligned} L_{0,k}^n &= \varphi(k); \quad X_{0,k}^n = 1; \quad D_{0,k}^n = 0, \quad \text{если } t[n] < 2 \text{ сут.}; \\ L_{0,k}^n &= 0; \quad X_{0,k}^n = 1; \quad D_{0,k}^n = 0 \quad \text{при условии, что } t[n] \geq 2 \text{ сут.}; \\ L_{N_x,k}^n &= L_{N_x-1,k}^n; \quad X_{N_x,k}^n = X_{N_x-1,k}^n; \quad D_{N_x,k}^n = D_{N_x-1,k}^n; \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} L_{j,0}^n &= L_{j,1}^n; \quad X_{j,0}^n = X_{j,1}^n; \quad D_{j,0}^n = D_{j,1}^n; \\ L_{j,N_y}^n &= L_{j,N_y-1}^n; \quad X_{j,N_y}^n = X_{j,N_y-1}^n; \quad D_{j,N_y}^n = D_{j,N_y-1}^n; \\ j &= \overline{0, N_x}; \quad k = \overline{0, N_y}; \quad n = \overline{1, M}. \end{aligned}$$

Методом гармоник для явной разностной схемы (3) было получено условие устойчивости следующего вида:

$$\tau \leq \frac{1}{\frac{1}{h_x} \left(U + \frac{2D_f}{h_x} \right) + \frac{1}{h_y} \left(V + \frac{2D_f}{h_y} \right)}.$$

Показано, что порядок погрешности аппроксимации явной разностной схемы (3)-(5) имеет первый порядок по времени и по пространству, т.е. $O(\tau, h_x, h_y)$.

Из теоремы Лакса [5],[6] следует, что имеет место сходимость решения разностной задачи к решению дифференциальной.

В настоящее время широко используется метод конечных объемов (МКО) [7], основная идея которого состоит в разбиении расчетной области на некоторое количество непересекающихся объемов так, чтобы любая узловая точка содержалась в соответствующем объеме. При выводе разностной схемы решения задачи самоочищения использовались идеи, изложенные в [7].

Введем обозначения: $\bar{W} = (L, X, D)^T$; $\bar{S} = (S_1, S_2, S_3)^T$, где

$$S_1 = -K_1 L_{j,k}^n - K_3 L_{j,k}^n - \frac{\mu_{\max} X_{j,k}^n L_{j,k}^n}{Y(K_L + L_{j,k}^n)} + J_B; \quad S_2 = \frac{\mu_{\max} X_{j,k}^n L_{j,k}^n}{K_L + L_{j,k}^n};$$

$$S_3 = K_1 L_{j,k}^n - K_2 D_{j,k}^n - \frac{\mu_{\max} X_{j,k}^n L_{j,k}^n}{K_L + L_{j,k}^n} + J_1 + J_2 - J_3.$$

В результате разностная схема, аппроксимирующая модификацию вышеуказанных моделей, в МКО запишется в виде:

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{\bar{W}_{j,k}^{n+1} - \bar{W}_{j,k}^n}{\tau} + U \frac{\bar{W}_{j+1,k}^n - \bar{W}_{j-1,k}^n}{2h_x} + V \frac{\bar{W}_{j,k+1}^n - \bar{W}_{j,k-1}^n}{2h_y} = \\ & \left(\bar{S}_{j,k}^n + D \left(\frac{\bar{W}_{j+1,k}^n - 2\bar{W}_{j,k}^n + \bar{W}_{j-1,k}^n}{h_x^2} \right) + D \left(\frac{\bar{W}_{j,k+1}^n - 2\bar{W}_{j,k}^n + \bar{W}_{j,k-1}^n}{h_y^2} \right) \right); \end{aligned} \right.$$

(6)

$$n = \overline{0, M-1}; \quad j = \overline{0, N_x-1}; \quad k = \overline{0, N_y-1};$$

$$L_{j,k}^0 = 0; X_{j,k}^0 = 1; D_{j,k}^0 = 0; \quad j = \overline{-1, N_x}; \quad k = \overline{-1, N_y};$$

(7)

$$L_{-1,k}^n = L_{0,k}^n = \varphi(k); \quad X_{-1,k}^n = X_{0,k}^n = 1; \quad D_{-1,k}^n = D_{0,k}^n = 0;$$

$$k = \overline{-1, N_y} \text{ при } 0 < t[n] < 2;$$

$$L_{-1,k}^n = L_{0,k}^n = 0; \quad X_{-1,k}^n = X_{0,k}^n = 1; \quad D_{-1,k}^n = D_{0,k}^n = 0;$$

$$k = \overline{-1, N_y} \text{ при } 2 \leq t[n] \leq T;$$

(8)

$$L_{N_x,k}^n = L_{N_x-1,k}^n; X_{N_x,k}^n = X_{N_x-1,k}^n; D_{N_x,k}^n = D_{N_x-1,k}^n;$$

$$k = \overline{-1, N_y}; \quad 0 < t[n] \leq T;$$

$$L_{j,-1}^n = L_{j,0}^n; X_{j,-1}^n = X_{j,0}^n; D_{j,-1}^n = D_{j,0}^n; j = \overline{-1, N_x}; \quad 0 < t[n] \leq T;$$

$$L_{j,N_y}^n = L_{j,N_y-1}^n; X_{j,N_y}^n = X_{j,N_y-1}^n; D_{j,N_y}^n = D_{j,N_y-1}^n; j = \overline{-1, N_x}; \quad 0$$

$$< t[n] \leq T.$$

Обсуждение результатов численных расчетов.

Исследуется участок реки Томи длиной 20 км и шириной 0.8 км. Численные расчеты проводились до момента времени T . Для решения разностной задачи и построения графиков написаны программы на языках Pascal и Matlab. На рассматриваемый участок реки, изображенный на рисунке 1, поступает загрязнение (субстрат) L (мг/л). Под загрязнением понимается легко окисляемые отходы, например, органического

происхождения. Процесс самоочищения протекает путем потребления субстрата микроорганизмами и за счет окисления загрязнения кислородом. Также учитываются процессы аэрации, инициируемые фотосинтезом, и связанные с поступлением органических веществ из донных отложений.

Результаты численных расчетов представлены на рис. 2-5.

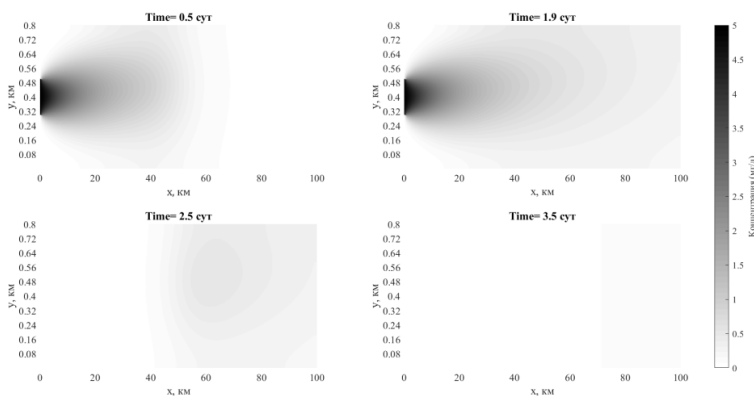


Рис. 2. Распределение концентрации субстрата L, мг/л

Графики распределения концентрации органического вещества L в моменты времени $t=0.5, 1.9, 2.5, 3.5$ сут представлены на рис.2. Из рисунка видно, что к моменту времени $t=0.5$ сут концентрация субстрата меняется от 5 до 4.7 мг/л на расстоянии 2.5 км. Распространение L происходит по форме, напоминающей параболу. На промежутке от 2.5 до 8 км по оси x концентрация загрязнения меняется от 4.7 до 5 мг/л, с 8-9 км величина L составляет 2.7-3.2 мг/л, на участке 9-15 км: 2.4-2.7 мг/л, 15-21 км: 1.4-2.3 мг/л, 21-40 км соответственно 0.8-1.4 мг/л, а для участка 40-70 км имеет место концентрация 0.4-

0.8 мг/л. На остальном участке реки $L=0$ мг/л. К моменту времени $t=1.9$ сут субстрат под действием течения реки постепенно распространяется до правой границы расчетной области на расстояние 100 км. После прекращения подачи загрязнений на 2-е сутки концентрация начинает стремительно уменьшаться, что показано на рис. 2 в моменты времени $t=2.5$, 3.5 сут.

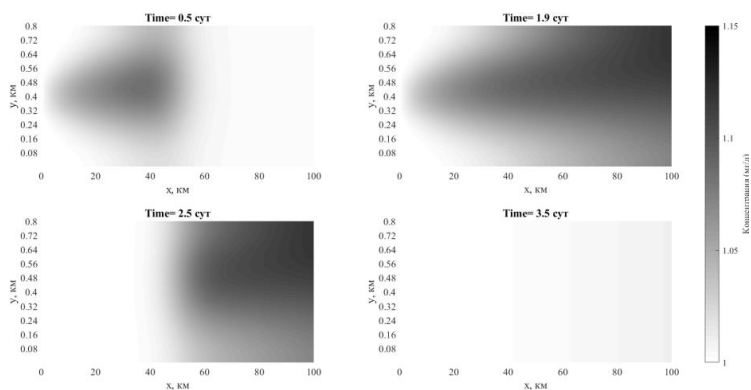


Рис. 3. Распределение биомассы микроорганизмов X

На временном интервале от 0 до 0.5 сут. концентрация микроорганизмов возрастает незначительно (от 1 до 1.1 мг/л). Это говорит о том, что влияние микроорганизмов на процесс самоочищения носит незначительный характер. Рост концентрации микроорганизмов наблюдается в направлении, совпадающем с направлением загрязнения, и захватывает участок реки длиной 62.5 км. В момент времени $t=1.9$ сут максимальная концентрация микроорганизмов достигается на правой границе расчетной области за счет потребления субстрата и течения реки, а с уменьшением L после 2 суток

концентрация микроорганизмов постепенно устанавливается на первоначальном значении 1 мл/л (моменты времени $t=2.5, 3.5$ сут, рис. 3).

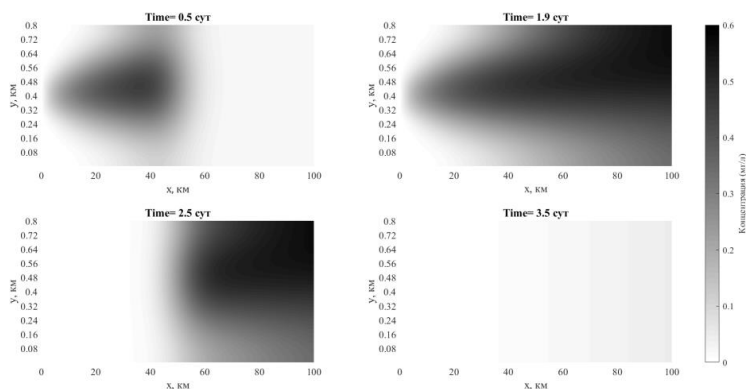


Рис. 4. Распределение дефицита кислорода D

Анализ результатов показывает, что основной вклад в процесс самоочищения загрязненного участка реки вносят окислительные процессы, связанные с реакциями органических соединений с кислородом. При этом дефицит кислорода возрастает за счет указанных реакций от 0 до 0.52 мг/л на участке длиной 65 км. Увеличение дефицита кислорода происходит в направлении, совпадающим с направлением распространения субстрата. При дальнейшем распространении субстрата L, дефицит кислорода возрастает в направлении оси x до 0.6 мг/л (момент времени $t=1.9$ сут, рис.4.). После 2 суток загрязняющий поток уменьшается, что приводит к сокращению расхода кислорода на окисление субстрата ($t=2.5, 3.5$ сут, на рис. 4).

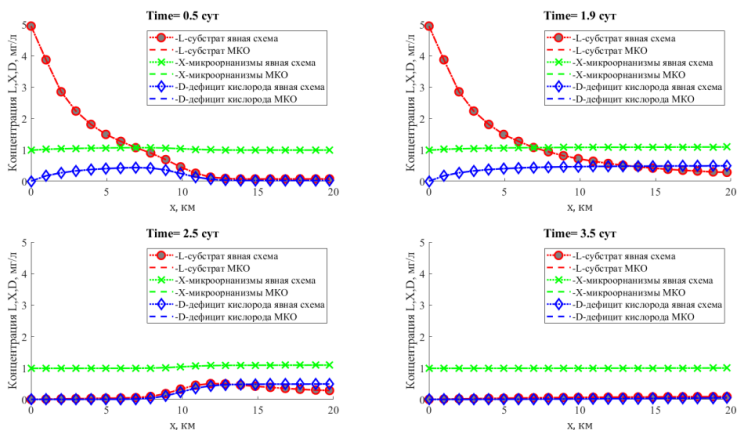


Рис. 5. Сравнение результатов численных расчетов

На рисунке 5 дается сравнение результатов численных расчетов по явной разностной схеме и по методу конечных объемов. На графиках изображен срез в узлах $(x_j, 50)$, $j = \overline{0, N_x}$. Из графика видно, что субстрат L распространяется по всей длине реки и его концентрация выше у левой границы. Концентрация микроорганизмов постепенно увеличивается слева на право. Дефицит кислорода также в направлении распространения субстрата по оси x . Из приведенного анализа видно, что результаты, полученные по указанным методам, совпадают между собой.

Заключение. Получены результаты численных расчетов по модификации моделей Моно, Стритера-Фелпса, Доббинса и Кемпа с помощью явного разностного метода и метода конечных объемов в двумерном приближении.

Исследованы вопросы аппроксимации, устойчивости и сходимости разностных методов. Полученные условия устойчивости использовались при проведении расчетов на компьютере.

Результаты, представленные в виде графиков, проанализированы и сделаны соответствующие выводы о возможности самоочищения загрязненного участка реки.

Список литературы

- [1] Хублярян М.Г. Водные потоки: модели течений и качества суши. М.: Наука. - 1991.
- [2] Абеяшев Д.Г. Математическое моделирование процессов самоочищения реки с использованием модификации моделей Герберта и Стритера-Фелпса // Седьмая Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям / Под ред. проф. А.В. Старченко. – Томск: Изд-во Том. ун-та. - 2014.
- [3] Вавилин В.А. Нелинейные модели биологической очистки и процессов самоочищения в реках. М.: Наука. - 1981.
- [4] Алехин В. Е. Анализ и совершенствование математических моделей для прогноза экологической надежности источников коммунального водоснабжения: диссертация кандидата технических наук: 05.17.08, 05.02.13.- Москва. - 2006.
- [5] Меркулова Н.Н., Михайлов М.Д. Методы приближенных вычислений. Томск: Издательский дом ТГУ. - 2014.

[6] Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука. - 1971.

[7] Патанкар С.В. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат. - 1984. – С.24.