

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

**Всероссийская молодежная
научная конференция
«Все грани математики и
механики»**

(24–28 апреля 2018 г.)

Сборник статей

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

Томск
Издательский Дом Томского государственного университета
2018

Математическое моделирование процессов биологической очистки сточных вод на основе модели Кенейла

Хуторная А. И., Михайлов М. Д.

Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск
e-mail: anas-kh@yandex.ru

Аннотация

Рассматривается модель Кенейла и ее модификация, основанная на усложненной пищевой цепочке вида: субстрат - бактерии - простейшие.

Математически модели представляют собой системы обыкновенных дифференциальных уравнений с соответствующими начальными условиями. Для численной реализации используется неявный метод Эйлера. Исследуются вопросы аппроксимации, устойчивости и сходимости метода. Результаты численных расчетов представлены в виде графиков. Дается анализ полученных результатов.

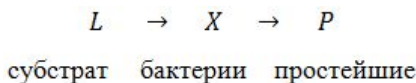
Ключевые слова: биологическая очистка, субстрат, бактерии, микроорганизмы, простейшие, модель, аппроксимация, устойчивость, сходимость, неявная схема.

Загрязнение окружающей среды отходами промышленного и сельскохозяйственного производства негативно сказывается на состоянии атмосферы населенных пунктов, водных ресурсов и здоровья населения. В связи с этим большое внимание уделяется проблемам экологии, в частности, очистки от загрязнения сточными водами. Поскольку сточные воды содержат множество различных органических веществ, важным звеном в процессе самоочищения является биологическая очистка. О ее сути говорится в [1].

В случае с активным илом сточные воды являются субстратом, который служит пищей для бактерий. Следует ожидать, что активный ил, растущий на таком субстрате, будет иметь сложный многовидовой состав. Поэтому процесс биологической очистки состоит в том, что гетерогенная популяция микроорганизмов потребляет многокомпонентный субстрат [2].

Особый интерес вызывает формирование биоценоза активного ила, так как видовой состав ила влияет на его активность и способность к отстаиванию. При изучении этого вопроса целесообразно

использовать модель Кенейла [2], в которой учитываются два трофических уровня и субстрат, а пищевая цепочка выглядит следующим образом:



Простейшие, питаясь бактериями и взвешенными веществами, способствуют осветлению воды и, до известной степени, обеззараживают ее. Кроме того, простейшие выполняют функцию индикаторов. По их развитию можно судить о качестве очистки сточных вод. Таким образом, модель Кенейла описывает пищевую цепочку между растворимым субстратом, гетеротрофной бактерией и простейшей реснитчатой [2]:

$$\begin{cases} \frac{dL}{dt} = -\frac{1}{Y} \frac{\mu_{max}XL}{K_L + L}, \\ \frac{dX}{dt} = \frac{\mu_{max}XL}{K_L + L} - \frac{f_{max}XP}{g(K_x + X)}, \\ \frac{dP}{dt} = \frac{f_{max}XP}{K_x + X}, \end{cases}, \quad (1)$$

$$L(0) = L^0, X(0) = X^0, P(0) = P^0,$$

где μ_{max} – максимальная удельная скорость роста микроорганизмов; K_L – константа полунасыщения, равная концентрации субстрата, при которой скорость процесса равна $\frac{\mu_{max}}{2}$, Y – коэффициент трансформации субстрата в биомассу; L, X, P – концентрация субстрата, бактерий и простейших соответственно, мг/л; f_{max} – максимальная удельная скорость роста реснитчатой; K_x – константа полунасыщения, равная концентрации бактерии, при которой скорость процесса равна $\frac{f_{max}}{2}$; g – экономический коэффициент простейших.

На рис. 2 представлены изменения концентраций основных параметров модели Кенейла с течением времени. Из графика изменения L видно, что очищение водоема происходит в течение 36 ч.

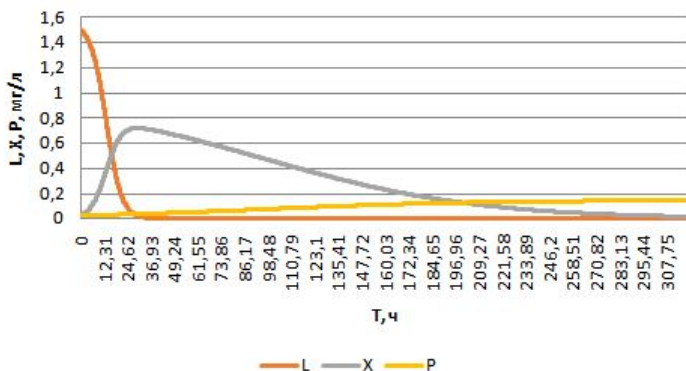


Рис. 1. Результаты численных расчетов модели Кенейла

Описание неявного метода Эйлера. Вопросы аппроксимации, устойчивости и сходимости

Для численного решения задачи (1) используется неявный метод Эйлера [3]. Вводится равномерная сетка $\omega_\tau = \{t_j | t_j = j\tau, j = \overline{0, N}\}$, и разностные уравнения для системы (1) записываются следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{L_{j+1} - L_j}{\tau} = -\frac{1}{Y} \frac{\mu_{max} X_{j+1} L_{j+1}}{K_L + L_{j+1}}, \\ \frac{X_{j+1} - X_j}{\tau} = \frac{\mu_{max} X_{j+1} L_{j+1}}{K_L + L_{j+1}} - \frac{f_{max} X_{j+1} P_{j+1}}{g(K_x + X_{j+1})}, \\ \frac{P_{j+1} - P_j}{\tau} = \frac{f_{max} X_{j+1} P_{j+1}}{K_x + X_{j+1}}, \\ L_0 = L^0, X_0 = X^0, P_0 = P^0. \end{cases} \quad (2)$$

Для исследования устойчивости разностной схемы (2) по начальным данным методом гармоник необходимо ее линеаризовать. Для этого используются следующие соотношения:

$$L_j = \dot{L}_j + \tilde{L}, X_j = \dot{X}_j + \tilde{X}, P_j = \dot{P}_j + \tilde{P}, \quad (3)$$

где $\dot{L}_j, \dot{X}_j, \dot{P}_j$ - малые величины, $\tilde{L}, \tilde{X}, \tilde{P}$ - значения L, X, P , определяющие положение стационарного равновесия, то есть

$$\frac{d\tilde{L}}{dt} = \frac{d\tilde{X}}{dt} = \frac{d\tilde{P}}{dt} = 0.$$

После подстановки (3) в (2) разностная схема линейизуется

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\dot{L}_{j+1} - \dot{L}_j}{\tau} = -\frac{1}{Y} \frac{\mu_{max} \tilde{L} \dot{X}_{j+1} + \tilde{X} \dot{L}_{j+1}}{K_L + \tilde{L}}, \\ \frac{\dot{X}_{j+1} - \dot{X}_j}{\tau} = \frac{\mu_{max}(\tilde{L} \dot{X}_{j+1} + \tilde{X} \dot{L}_{j+1})}{K_L + \tilde{L}} + \frac{\mu_{max} \tilde{X} \tilde{L} \dot{X}_{j+1}}{(K_L + \tilde{L})(K_x + \tilde{X})} - \\ - \frac{f_{max}(\tilde{P} \dot{X}_{j+1} + \tilde{X} \dot{P}_{j+1})}{f_{max} \tilde{X} \tilde{P} \dot{L}_{j+1}} - \frac{g(K_x + \tilde{X})}{g(K_x + \tilde{X})(K_L + \tilde{L})}, \\ \frac{P_{j+1} - P_j}{\tau} = \frac{f_{max}(\tilde{P} \dot{X}_{j+1} + \tilde{X} \dot{P}_{j+1})}{K_x + \tilde{X}} \end{array} \right. \quad (4)$$

и применяется метод гармоник. В результате проведенных исследований получается условие, которое не обеспечивает устойчивость схемы (4) при численной реализации данного метода. Поэтому проверка на устойчивость осуществляется с помощью численного эксперимента с шагами τ и $\tau/2$. Численные расчеты представляются в виде двух графиков на рис.2. Анализ графиков показывает, что результаты, полученные с шагами τ и $\tau/2$, совпадают. Это означает, что схема устойчива. Для исследования погрешности аппрок-

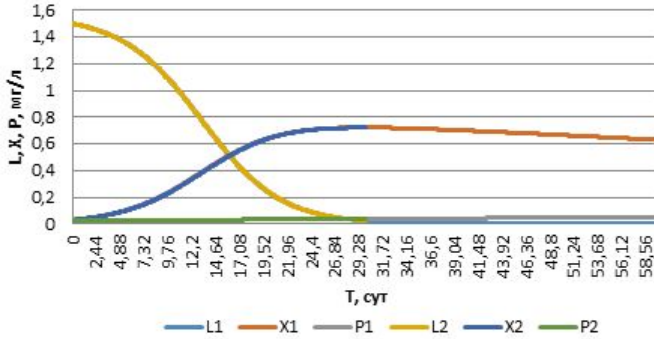


Рис. 2. Численные расчеты по модели Кенейла с шагами τ и $\frac{\tau}{2}$

симации составляются функции погрешности для соответствующих уравнений разностной схемы (2). Пусть $\psi_1(t_{j+1})$ - функция погрешности для первого уравнения, $\psi_2(t_{j+1})$, $\psi_3(t_{j+1})$ - для второго и

третьего соответственно:

$$\begin{cases} \psi_1(t_{j+1}) = \frac{L_{j+1} - L_j}{\tau} + \frac{1}{Y} \frac{\mu_{max} X_{j+1} L_{j+1}}{K_L + L_{j+1}}, \\ \psi_2(t_{j+1}) = \frac{X_{j+1} - X_j}{\tau} - \frac{\mu_{max} X_{j+1} L_{j+1}}{K_L + L_{j+1}} + \frac{f_{max} X_{j+1} P_{j+1}}{g(K_x + X_{j+1})}, \\ \psi_3(t_{j+1}) = \frac{P_{j+1} - P_j}{\tau} - \frac{f_{max} X_{j+1} P_{j+1}}{K_x + X_{j+1}}. \end{cases} \quad (5)$$

Для оценки порядка погрешности аппроксимации предполагается, что $L, X, P \in C^2[0, T]$ и функции L, X и P из (5) разлагаются в ряд Тейлора в окрестности узла t_{j+1} :

$$\begin{cases} \psi_1(t_{j+1}) = \left(L_{j+1} - L_{j+1} + \frac{dL(t_{j+1})}{dt} \tau - \frac{d^2 L(\tilde{t})}{dt^2} \frac{\tau^2}{2} \right) \frac{1}{\tau} + \\ \quad + \frac{1}{Y} \frac{\mu_{max} X_{j+1} L_{j+1}}{K_L + L_{j+1}}, \\ \psi_2(t_{j+1}) = \left(X_{j+1} - X_{j+1} + \frac{dX(t_{j+1})}{dt} \tau - \frac{d^2 X(\tilde{t})}{dt^2} \frac{\tau^2}{2} \right) \frac{1}{\tau} - \\ \quad - \frac{\mu_{max} X_{j+1} L_{j+1}}{K_L + L_{j+1}} + \frac{f_{max} X_{j+1} P_{j+1}}{g(K_x + X_{j+1})}, \\ \psi_3(t_{j+1}) = \left(P_{j+1} - P_{j+1} + \frac{dP(t_{j+1})}{dt} \tau - \frac{d^2 P(\tilde{t})}{dt^2} \frac{\tau^2}{2} \right) \frac{1}{\tau} - \\ \quad - \frac{f_{max} X_{j+1} P_{j+1}}{K_x + X_{j+1}}, \end{cases} \quad (6)$$

где $\tilde{t}, \tilde{t}, \tilde{t} \in (t_j, t_{j+1})$.

Таким образом получается, что

$$\psi_1(t_{j+1}) = -\frac{\tau}{2} \frac{d^2 L(\tilde{t})}{dt^2}, \psi_2(t_{j+1}) = -\frac{\tau}{2} \frac{d^2 X(\tilde{t})}{dt^2}, \psi_3(t_{j+1}) = -\frac{\tau}{2} \frac{d^2 P(\tilde{t})}{dt^2}. \quad (7)$$

Для начальных условий функции погрешности запишутся:

$$\psi_4(t_0) = 0, \psi_5(t_0) = 0, \psi_6(t_0) = 0. \quad (8)$$

Вектор невязки имеет вид:

$$\bar{\delta}f = \left(-\frac{\tau}{2} \frac{d^2 L(\tilde{t})}{dt^2}, -\frac{\tau}{2} \frac{d^2 X(\tilde{t})}{dt^2}, -\frac{\tau}{2} \frac{d^2 P(\tilde{t})}{dt^2}, 0, 0, 0 \right)^T. \quad (9)$$

Норма вектора невязки определяется следующим образом:

$$\|\bar{\delta}f\| = \max(\|\delta_1 f\|, \|\delta_2 f\|, \|\delta_3 f\|, \|\delta_4 f\|, \|\delta_5 f\|, \|\delta_6 f\|). \quad (10)$$

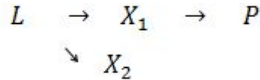
где

$$\begin{aligned}\|\delta_1 f\| &= \max_{t \in \omega_\tau} \left| -\frac{\tau}{2} \frac{d^2 L(t)}{dt^2} \right| = \tau C_1, & C_1 &= \frac{1}{2} \max_{t \in \omega_\tau} \left| \frac{d^2 L(t)}{dt^2} \right|, \\ \|\delta_2 f\| &= \max_{t \in \omega_\tau} \left| -\frac{\tau}{2} \frac{d^2 X(t)}{dt^2} \right| = \tau C_2, & C_2 &= \frac{1}{2} \max_{t \in \omega_\tau} \left| \frac{d^2 X(t)}{dt^2} \right|, \\ \|\delta_3 f\| &= \max_{t \in \omega_\tau} \left| -\frac{\tau}{2} \frac{d^2 P(t)}{dt^2} \right| = \tau C_3, & C_3 &= \frac{1}{2} \max_{t \in \omega_\tau} \left| \frac{d^2 P(t)}{dt^2} \right|, \\ & \|\delta_4 f\| = \|\delta_5 f\| = \|\delta_6 f\| = 0.\end{aligned}$$

Отсюда вытекает, что $\|\bar{\delta} f\| \leq \tau C$, где $C = \max(C_1, C_2, C_3)$ и погрешность аппроксимации имеет первый порядок относительно τ . Из теоремы Лакса [3] следует, что решение разностной задачи (2) сходится к решению дифференциальной (1).

Об одной модификации модели Кенейла

Модель Кенейла (1) используется Кердсом [4] при моделировании более сложных пищевых цепей, включающих несколько видов бактерий и простейших. В данной работе рассматривается следующая пищевая цепочка:



Такая цепь служит примером конкуренции между двумя микроорганизмами за один субстрат. При таком взаимодействии наблюдается явление хищничества между простейшей с одним или несколькими видами бактерий.

Предполагается, что имеется постоянный приток воды (речной водоем) с неизменной концентрацией субстрата в реактор [4], а также отток жидкости, содержащей субстрат, бактерии и простейших из реактора. Считается, что скорость вливания субстрата постоянна, так же, как и скорость вымывания. Объем водоема постоянен и культура, состоящая из субстрата, бактерий и простейших, хорошо размешивается. Кроме того, скорость разбавления остается величиной постоянной и обозначается через D .

Система, описывающая данную пищевую цепь, приводится ни-

же:

$$\begin{cases} \frac{dL}{dt} = DL_0 - DL - \frac{1}{Y} \frac{\mu_{max1} X_1 L}{K_{L1} + L} - \frac{1}{Y} \frac{\mu_{max2} X_2 L}{K_{L2} + L}, \\ \frac{dX_1}{dt} = \frac{\mu_{max1} X_1 L}{K_{L1} + L} - DX_1 - \frac{f_{max} X_1 P}{g(K_x + X_1)}, \\ \frac{dX_2}{dt} = \frac{\mu_{max2} X_2 L}{K_{L2} + L} - DX_2, \\ \frac{dP}{dt} = -DP + \frac{f_{max} X_1 P}{K_x + X_1}, \\ L(0) = L^0, X_1(0) = X_1^0, X_2(0) = X_2^0, P(0) = P^0, \end{cases}, \quad (11)$$

где P – концентрация простейших, L_0 – концентрация субстрата во втекающей среде, D – скорость разбавления. Рассматривается несколько случаев для модели (11): 1. $DL_0 = 0$; 2. $DL_0 \neq 0$.

а) $DL_0 = 0$. При выполнении условия а) не происходит постоянного притока субстрата, что приводит к полному очищению водоема и к быстрому вымыванию всех микроорганизмов. Данная ситуация представлена на рис. 3.

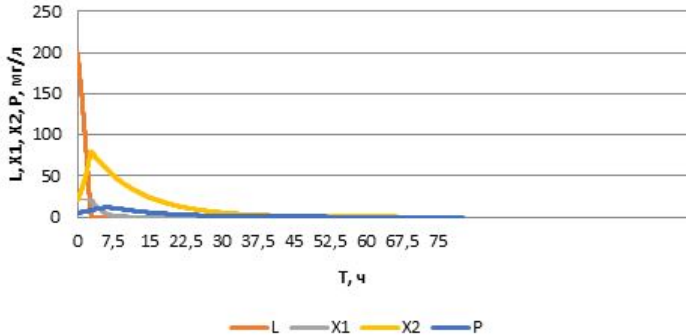


Рис. 3. Удельная скорость роста бактерий

б) $DL_0 \neq 0$.

В этом случае предполагается, что простейшая реснитчатая питается эффективной бактерией (X_1). Максимальная удельная скорость роста реснитчатой предполагается высокой. Получается колебательное движение всех популяций (см. рис. 4) – X_1, X_2, P . При повышении уровня хищничества реснитчатой концентрация эффективной бактерии падает. Это влияет на поведение субстрата: наблюдается рост загрязнения. Происходит конкуренция между двумя бактериями, которая приводит к ступенчатому поведению субстрата. Когда эффективная бактерия доминирует, концентрация суб-

страта становится такой же, как если бы эта бактерия была единственным присутствующим организмом. Аналогично, когда доминирует неэффективный организм, концентрация субстрата приближается к тому, что было бы получено, если бы этот организм рос сам по себе. Когда обе бактерии находятся на низком уровне, концентрация субстрата достигает пика (рис. 4).

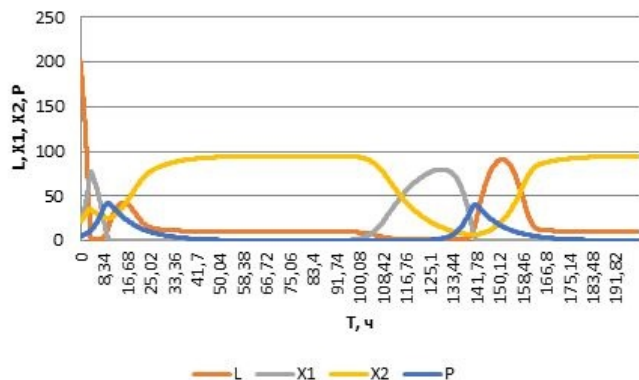


Рис. 4. Удельная скорость роста бактерий

В том случае, когда прекращается поступление субстрата в реактор в момент времени t , поведение всех популяций изображено на рис.5.

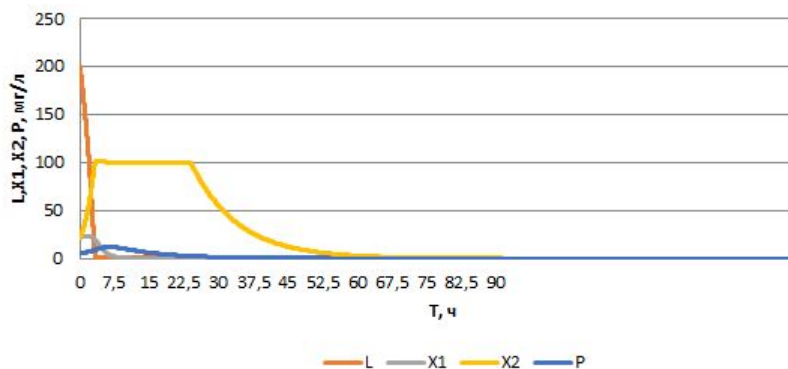


Рис. 5. Удельная скорость роста бактерий

Заключение

В работе рассматриваются модель Кенейла и ее модификация. Математически – это системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с соответствующими начальными условиями. Для реализации моделей используется неявный метод Эйлера. Исследуются вопросы аппроксимации, устойчивости и сходимости данного метода. Результаты численных расчетов представлены в виде графиков, построенных в Excel. Анализ результатов показывает, что в процессе очистки сточных вод значительную роль играет содержание микроорганизмов в водной среде. Усложнение пищевой цепи происходит за счет увеличения числа бактерий и появления нескольких видов простейших. В результате возникает конкуренция и хищничество между микроорганизмами и простейшими. Это важный момент, который стоит учитывать при очистке сточных вод.

Литература

1. Хуторная А.И. Метод биологической очистки сточных вод на примере модели Халдейна // Всероссийская молодежная научная конференция «Все грани математики и механики». – 2017. – С. 152–161.
2. Вавилин В.А. Нелинейные модели биологической очистки и процессов самоочищения в реках. – М.:Наука, 1983. – 156 с.
3. Меркулова Н.Н., Михайлов М.Д. Методы приближенных вычислений: Учебное пособие. – Томск: ТМЛ-Пресс, 2007. – Ч.2. – 288 с.
4. Curds C.R. Computer simulations of some complex microbial food chains // Water Research. – 1974. – Vol.8, №10. – P. 769–780.