

УДК 519.6

М.Д. Михайлов

## ОБ ОДНОЙ МОДИФИКАЦИИ МОДЕЛИ СТРИТЕРА – ФЕЛПСА И ЕЕ ЧИСЛЕННОЙ РЕАЛИЗАЦИИ С ПОМОЩЬЮ МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

В классической модели Стритера – Фелпса рассматривается система, состоящая из воды и растворенного в ней кислорода и органических веществ. Математически она описывается системой двух обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с соответствующими начальными условиями. В работе применяется модель, представляющая собой модификацию классической модели Стритера – Фелпса, построенную посредством введения в нее биофильтра и добавления конвективных и диффузионных членов. Параллельная реализация алгоритма численного расчета модели производится с использованием явной разностной схемы на кластере ТГУ.

**Ключевые слова:** самоочищение, биофильтр, численный метод, разностная схема.

### 1. Построение модифицированной модели Стритера –Фелпса

Важнейшей характеристикой качества воды является концентрация растворенного в ней кислорода, необходимого элемента жизнедеятельности водорослей и растений. Эта величина носит название биохимической потребности в кислороде (БПК) и численно выражается количеством кислорода в мл/л или г/м<sup>3</sup>. В модели Стритера – Фелпса концентрация растворенного кислорода и органических отходов взаимосвязаны [1]. Разложение отходов происходит под воздействием бактерий, вызывающих химическую реакцию с использованием растворенного в воде кислорода.

Скорость разложения органического вещества описывается уравнением

$$\frac{dL}{dt} = -k_1L, \quad (1)$$

где  $L(t)$  – концентрация органического вещества,  $t$  – время,  $k_1$  – коэффициент разложения органического вещества, 1/сут.

Обозначим  $D$  – дефицит кислорода, т.е.  $D = q - q_0$ , где  $q$  – реальная концентрация кислорода в воде,  $q_0$  – равновесная концентрация кислорода, которая имеет место при отсутствии загрязнения.

Динамика дефицита кислорода описывается обыкновенным дифференциальным уравнением вида

$$\frac{dD}{dt} = k_1L - k_2D, \quad (2)$$

где  $k_2$  – коэффициент аэрации, 1/сут.

В процесс самоочищения, описываемый с помощью уравнений (1) и (2), включается очистка с помощью биофильтра путем добавления слагаемого  $-kL$  в (1):

$$\frac{dL}{dt} = -k_1 L - kL, \quad (3)$$

где  $k$  – константа скорости изъятия органических загрязнений, 1/сут, вычисляемая по формуле

$$k = k_{20} \cdot 1,047^{T-20}. \quad (4)$$

Здесь  $k_{20}$  – константа скорости биохимических процессов в сточной воде при температуре 20 °С,  $T$  – температура сточной воды, °С. Для определения коэффициента  $k_1$  используются формулы

$$k_1 = 10 \alpha F_2 + \beta, \quad (5)$$

$$F_2 = \frac{H^x B_{y0}^y k_t^c}{qz}, \quad (6)$$

где  $\alpha, \beta$  – постоянные коэффициенты, определяемые из табл. 25 [2, с. 80]. Таким образом, модификация модели самоочищения Стритера–Фелпса с добавлением биофильтра, описывается системой ОДУ (3), (2) с соответствующими начальными условиями:

$$\begin{aligned} \frac{dL}{dt} &= -k_1 L - kL, \\ \frac{dD}{dt} &= k_1 L - k_2 D, \end{aligned} \quad (7)$$

$$L(0) = L^0, D(0) = D^0. \quad (8)$$

Модификация построенной модели (7), (8) на двумерный случай заключается в добавлении в систему (7) оператора диффузии  $\Delta = \lambda \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)$  и конвективного члена  $\left( U \frac{\partial}{\partial x} + V \frac{\partial}{\partial y} \right)$ , в результате чего модель принимает вид системы дифференциальных уравнений в частных производных

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial t} + \left( U \frac{\partial L}{\partial x} + V \frac{\partial L}{\partial y} \right) &= \lambda_L \left( \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 L}{\partial y^2} \right) - k_1 L - kL, \\ \frac{\partial D}{\partial t} + \left( U \frac{\partial D}{\partial x} + V \frac{\partial D}{\partial y} \right) &= \lambda_D \left( \frac{\partial^2 D}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 D}{\partial y^2} \right) + k_1 L - k_2 D \end{aligned} \quad (9)$$

с соответствующими начальными

$$L(x, y, 0) = L^0(x, y), D(x, y, 0) = D^0(x, y) \quad (10)$$

и граничными условиями

$$\left. \frac{\partial L}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial L}{\partial x} \right|_{x=L_x} = 0, \left. \frac{\partial L}{\partial y} \right|_{y=0} = \left. \frac{\partial L}{\partial y} \right|_{y=L_y} = 0, \quad (11)$$

$$\left. \frac{\partial D}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial D}{\partial x} \right|_{x=L_x} = 0, \left. \frac{\partial D}{\partial y} \right|_{y=0} = \left. \frac{\partial D}{\partial y} \right|_{y=L_y} = 0, \quad (12)$$

где  $U > 0, V = 0$  – компоненты вектора скорости течения реки, км/сут;  $\lambda_L, \lambda_D$  – коэффициенты диффузии. Решение задачи (9) – (12) ищется в области  $\bar{Q} = \bar{G} \times [0, T]$ ,  $\bar{G} = \{(x, y) | 0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y\}$ .

## 2. Выбор явного численного метода.

### Вопросы аппроксимации, устойчивости и сходимости

Покроем область  $\bar{Q}$  равномерной сеткой  $\bar{\omega}_{ht} = \bar{\omega}_h \times \omega_\tau$ , где

$$\bar{\omega}_h = \begin{cases} (x_j, y_k) | x_j = j \cdot h_x, y_k = k \cdot h_y, j, k = \overline{0, N+1}; \\ h_x = \frac{L_x}{N+1}, h_y = \frac{L_y}{N+1}, \end{cases}$$

и запишем разностную аппроксимацию дифференциальной задачи (9) – (12):

$$\Lambda_h \bar{W}^{(h)} = \bar{F}^{(h)}, \quad (13)$$

где

$$\Lambda_h \bar{W}^{(h)} \equiv \begin{cases} \frac{\bar{W}_{j,k}^{n+1} - \bar{W}_{j,k}^n}{\tau} + U \left( \frac{\bar{W}_{j,k}^n - \bar{W}_{j-1,k}^n}{h_x} + \frac{\bar{W}_{j,k}^n - \bar{W}_{j,k-1}^n}{h_y} \right) - \\ - \lambda_{\bar{W}} \left( \frac{\bar{W}_{j+1,k}^n - 2\bar{W}_{j,k}^n + \bar{W}_{j-1,k}^n}{h_x^2} + \frac{\bar{W}_{j,k+1}^n - 2\bar{W}_{j,k}^n + \bar{W}_{j,k-1}^n}{h_y^2} \right), \\ j, k = \overline{1, N}; n = \overline{0, M-1}; \\ \bar{W}_{j,k}^0, j, k = \overline{0, N+1}, \\ \frac{\bar{W}_{1,k}^n - \bar{W}_{0,k}^n}{h_x}, \\ \frac{\bar{W}_{N+1,k}^n - \bar{W}_{N,k}^n}{h_x}, k = \overline{0, N+1}; n = \overline{1, M}; \\ \frac{\bar{W}_{j,1}^n - \bar{W}_{j,0}^n}{h_y}, \\ \frac{\bar{W}_{j,N+1}^n - \bar{W}_{j,N}^n}{h_y}, j = \overline{0, N+1}, n = \overline{1, M}; \end{cases} \quad (14)$$

$$\bar{F}^{(h)} \equiv \begin{cases} \bar{f}_{j,k}^n, j, k = \overline{1, N}; n = \overline{0, M}; \\ \bar{W}_{j,k}^n, j, k = \overline{0, N+1}; \\ \bar{0}, \\ \bar{0}, \\ \bar{0}, \\ \bar{0}, \end{cases} \quad (15)$$

$$\bar{f}_{j,k}^n = (-k_1 L_{j,k}^n - k_2 L_{j,k}^n; k_1 L_{j,k}^n - k_2 D_{j,k}^n)^T, \bar{W}_{j,k}^n = (L_{j,k}^n, \bar{D}_{j,k}^n)^T,$$

$$L_{j,k}^n = \begin{cases} L_{j,k}^0, j, k = \overline{0, 2}; \\ 0, j, k = \overline{3, N+1}; \end{cases} \quad D_{j,k}^n = 0, j, k = \overline{0, N+1}.$$

Нетрудно показать, что погрешность аппроксимации разностной задачи с учетом начальных и граничных условий имеет порядок  $O(\tau + h_x + h_y)$ .

С учетом условия монотонности разностной схемы (13)

$$\tau < \frac{h_x^2 h_y^2}{(U h_x h_y^2 + V h_y h_x^2 + 2\lambda_{\bar{w}} h_y^2 + 2\lambda_{\bar{w}} h_x^2)}, \quad (16)$$

с помощью принципа максимума легко доказывается устойчивость разностной схемы (13) по начальным данным. Тогда по теореме Лакса [3] имеет место сходимость решения разностной задачи к решению дифференциальной задачи.

### 3. О результатах реализации параллельного алгоритма

Реализация модифицированной модели (13) – (15) проводится на равномерной сетке размерности  $202 \times 202$  при  $h_x = 0,49751$  км,  $h_y = 0,00995$  км на кластере ТГУ. Шаг по времени выбирается из условия устойчивости (16) и равен  $\tau = 7,74846 \cdot 10^{-6}$  сут. В табл. 1 приводится время работы параллельной программы на одном и на  $p$  процессорах, а также величина достигнутого ускорения алгоритма и его эффективность [4].

Таблица 1

Количество процессоров $p$	$T_1$ – время работы параллельной программы на одном процессоре	$T_p$ – время работы параллельной программы на $p$ процессорах	Ускорение $S_p = \frac{T_1}{T_p}$	Эффективность $E_p = \frac{S_p}{p}$
1	485,78874			
2		347,05410	1,39975	0,69987
3		252,09258	1,92703	0,48176
4		211,21259	2,29999	0,45999
5		159,34102	3,04874	0,38109
6		152,40118	3,18757	0,31876

Анализ результатов, приведенных в табл. 1, показывает, что параллельный алгоритм демонстрирует удовлетворительные результаты для ускорения  $S_p$  при увеличении числа задействованных процессоров  $p$ . Спад эффективности объясняется увеличением числа межпроцессорных обменов с ростом  $p$ .

### 4. Обсуждение результатов численных расчетов

Численные расчеты процесса самоочищения проводятся на загрязненном участке реки Томь длиной 100 км и шириной 2 км. В качестве загрязняющего вещества берется фенол, причем загрязнение в начальный момент времени на участке длиной 30 км и шириной 600 м равно 7,4 мг/л, а в остальных местах рассматриваемого участка  $L = 0$  мг/л, дефицит кислорода при  $t = 0$  равен нулю на всем рассматриваемом участке реки.

Анализ результатов численного расчета точечной модели Стритера – Фелпса с учетом трех типов биофильтров: а) с плоскостной загрузкой; б) капельного; в) высоконагружаемого, показывает, что применение биофильтра а) позволяет снизить концентрацию органического вещества до допустимого уровня за время  $t = 0,7$  сут.

Использование капельного биофильтра при тех же начальных условиях приводит к ПДК за  $t = 0,5$  сут. Наиболее эффективно работает высоконагружаемый биофильтр: достижение допустимой концентрации органического вещества занимает  $t = 0,1$  сут.

На рис. 1 – 4 представлены графики  $L$  и  $D$ , построенные по результатам реализации одномерной пространственной модели без использования биофильтра и с использованием высоконагружаемого биофильтра. Из рисунков видно, что процесс самоочищения во втором случае существенно упрощается и через  $t = 1,5$  сут  $L$  падает до безопасной величины  $0,001$  мг/л.

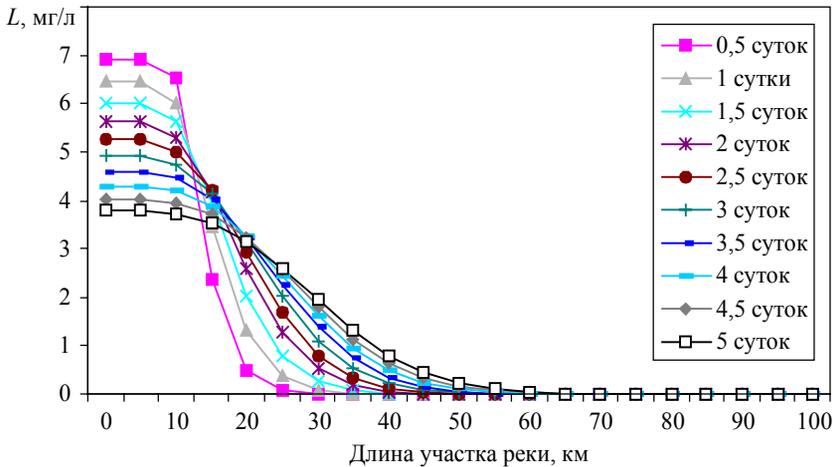


Рис. 1. Одномерная пространственная модель Стритера – Фелпса. Изменение концентрации органического вещества без использования биофильтра в различные временные промежутки. Начальная концентрация  $L_0 = 7,4$  мг/л

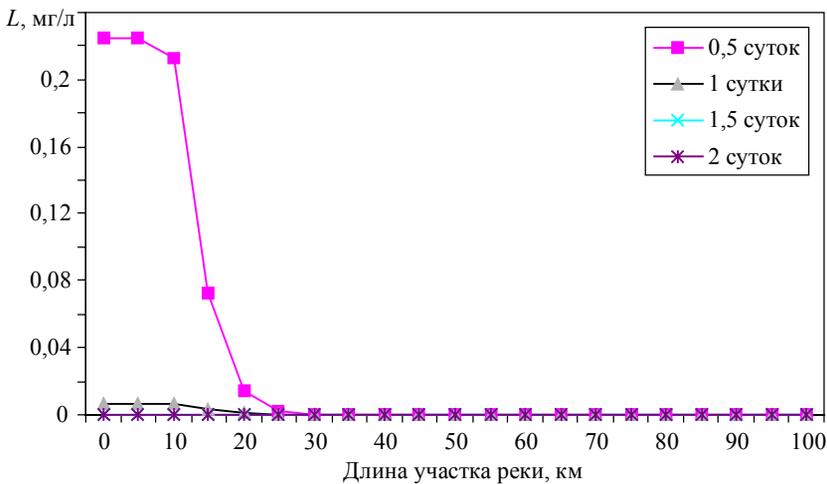


Рис. 2. Одномерная пространственная модель Стритера – Фелпса. Изменение концентрации органического вещества с использованием биофильтра в различные временные промежутки.  $L_0 = 7,4$  мг/л

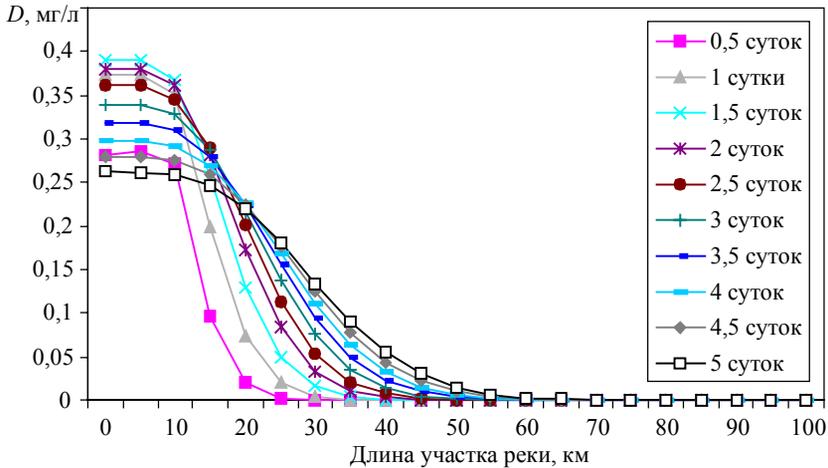


Рис. 3. Одномерная пространственная модель Стритера – Фелпса. Изменение дефицита кислорода без использования биофильтра в различные временные промежутки. Начальная концентрация  $L_0 = 7,4$  мг/л,  $D_0 = 0$  мг/л

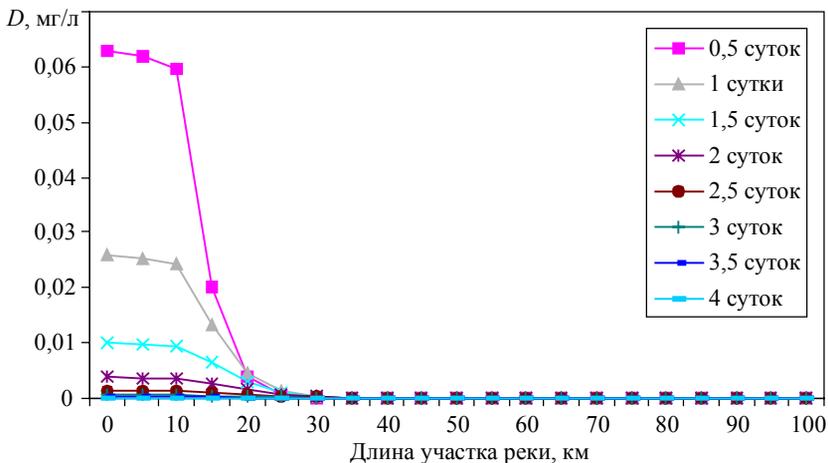


Рис. 4. Одномерная пространственная модель Стритера – Фелпса. Изменение дефицита кислорода с использованием биофильтра в различные временные промежутки.  $L_0 = 7,4$  мг/л,  $D_0 = 0$  мг/л

Из анализа графиков 5 и 6 (двумерный случай) также следует, что использование биофильтра существенно ускоряет процесс самоочистки загрязненного участка реки и за время  $t = 0,5$  сут концентрация органического вещества  $L$ , полученная после численной реализации модифицированной модели Стритера – Фелпса, равна  $0,14298$  мг/л, а дефицит кислорода  $D = 4,44611$  мг/л.

Процесс самоочистки без использования биофильтра занимает около 70 суток. По истечении этого периода времени концентрация загрязняющего вещества (фенола) падает до  $L = 0,001$  мг/л.

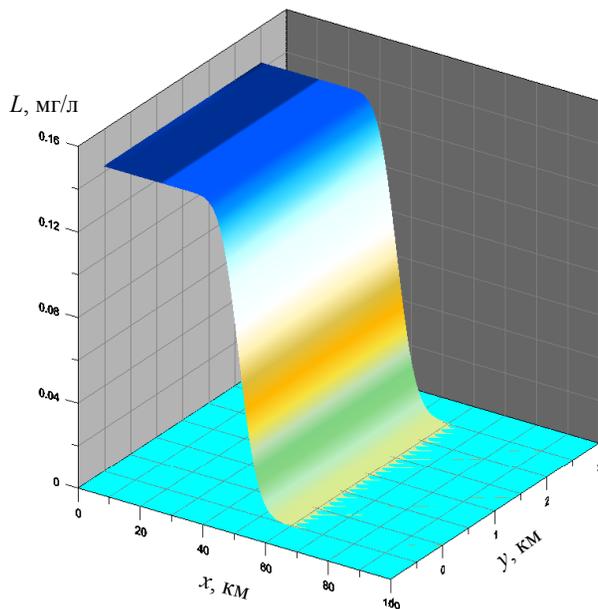


Рис. 5. Модификация двумерной модели Стритера – Фелпса с учетом биофильтра.  $L_0 = 7,4$  мг/л,  $t = 0,5$  сут,  $x$  – длина участка реки, км,  $y$  – ширина участка реки, км

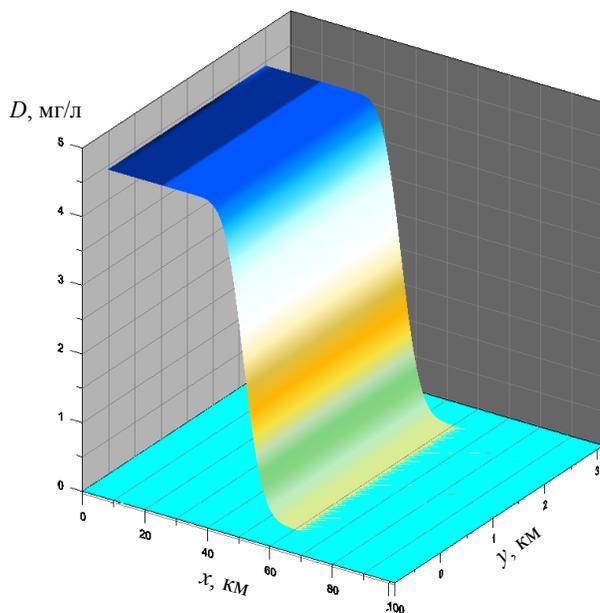


Рис. 6. Модификация двумерной модели Стритера – Фелпса с учетом биофильтра.  $D_0 = 0$  мг/л,  $t = 0,5$  суток,  $x$  – длина участка реки, км;  $y$  – ширина участка реки, км

Для проверки достоверности полученных в работе результатов проведены расчеты с использованием двумерной модифицированной модели и исходных данных, взятых из [5]. По результатам вычислений концентрация органического вещества  $L$  падает до 3,7 мг/л. Это хорошо согласуется с результатами, приведенными в [5].

Из приведенного анализа следует, что модель Стритера – Фелпса, в которой учитываются конвективный и диффузионный члены, а также биофильтр, достоверно описывает механизм процесса самоочищения загрязненного участка реки.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Вавилин В.А.* Нелинейные модели биологической очистки и процессов самоочищения в реках. М.: Наука, 1981. 160 с.
2. *Яковлев С.В., Воронов Ю.П.* Биологические фильтры. М.: Стройиздат, 1982. 120 с.
3. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1989. 616 с.
4. *Старченко А.В., Есаулов А.О.* Параллельные вычисления на многопроцессорных вычислительных системах. Томск: Изд-во ТГУ, 2002. 56 с.
5. *Очистка бытовых сточных вод на установках серии «Капля» // Экология и промышленность России.* – 2006. – Октябрь.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ:

**МИХАЙЛОВ Михаил Дмитриевич** – старший преподаватель кафедры вычислительной математики и компьютерного моделирования механико-математического факультета Томского государственного университета. E-mail: michel@math.tsu.ru

Статья принята в печать 13.02.2010 г.