

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

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

(25–28 апреля 2017 г.)

Сборник статей

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

Томск
Издательский Дом Томского государственного университета
2017

Математическое моделирование процессов биологической очистки сточных вод на примере модели Халдейна

Хуторная А. И.

ТГУ, Томск

e-mail: anas-kh@yandex.ru

Аннотация

В данной работе рассматривается метод очистки сточных вод с помощью микроорганизмов с использованием математической модели Халдейна. Изучаются особенности данной модели, ее приемущества перед классической моделью Моно. Численная реализация модели Халдейна осуществляется с помощью явного метода Эйлера. Проводится оценка погрешности аппроксимации и исследование устойчивости метода с применением численного эксперимента. Численные расчеты представляются в виде графиков, иллюстрирующих изменение концентрации микроорганизмов и загрязнителя. Даётся сравнение результатов, полученных с помощью модели Халдейна и модели Моно.

Ключевые слова: микроорганизмы, субстрат, ингибирование, аппроксимация, устойчивость, модель, численный метод.

В связи с ростом промышленного и сельскохозяйственного производства все больше внимания уделяется охране окружающей среды от загрязнений, в том числе сохранению чистоты водоемов. Существуют различные методы очистки [1]: механические, химические, физико-химические, биологические.

Механический метод используется для очистки бытовых сточных вод путем выделения нерастворимых примесей и промышленных вод, а также отстаивания и фильтрации.

Химический метод заключается в том, что в сточные воды добавляются различные химические реагенты, которые вступают в реакцию с загрязнителями и превращают их в нерастворимый осадок.

При физико-химическом методе обработки удаляются растворенные неорганические примеси и разрушаются органические и плохо окисляемые вещества. Примером такого метода является электролиз.

Самую большую роль в очистке водной среды играет биологический метод, являющийся обязательным звеном в обработке загрязненных вод до их поступления в водоемы. Сущность процесса биологической очистки состоит в том, что растворенные в воде органические вещества потребляются микроорганизмами, при этом часть органических веществ окисляется, а часть трансформируется в биомассу.

Метод биологической очистки исследовался многими авторами, в частности французским микробиологом Жаном Моно, который в своей модели использовал достаточно простую зависимость процесса роста микроорганизмов и уменьшения концентрации субстрата. Фрэнк Герберд, занимавшийся этой проблемой, учитывал способность самоокисления бактерий, что позволило ему описать в своей модели фазу отмирания микроорганизмов. Джон Халдейн добавил в модель Моно описание ингибирующего свойства субстрата [2].

Процесс биологической очистки

Суть процесса биологической очистки состоит в том, что загрязнение (субстрат), попав в водную среду с микроорганизмами, трансформируется в биомассу, а часть его окисляется. Более подробно процесс описан в работе [1].

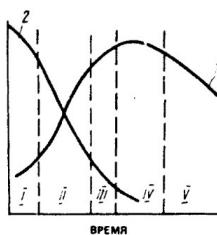


Рис. 1. Динамика роста микроорганизмов X (на рис. помечено цифрой 1) и потребления субстрата L (на рис. - цифра 2)

Выделяется несколько стадий для описания динамики роста микроорганизмов (см. рис. 3): I) фаза задержки роста – лаг-фаза; II) фаза логарифмического роста; III) фаза замедления роста; IV) фаза стационарного роста; V) фаза отмирания.

Концентрация биомассы микроорганизмов выражается в граммах сухого вещества на литр, концентрация субстрата - в граммах на литр или в молях.

Для описания скорости роста микроорганизмов используется

дифференциальное уравнение:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X, \quad (14)$$

где μ - удельная скорость роста микроорганизмов, сут⁻¹; X - концентрация микроорганизмов, мг/л; t - время, сут.

Концентрация субстрата изменяется со скоростью:

$$\frac{dL}{dt} = -\frac{1}{Y} \mu X, \quad (15)$$

где $Y = |\frac{dX}{dL}|$ - коэффициент трансформации субстрата в биомассу или экономический коэффициент; L - концентрация субстата, мг/л.

Значение μ считается постоянным лишь в фазе ускоренного роста, а в общем случае оно зависит от концентрации лимитирующего субстрата. Для такой зависимости в [1] рассматривается формула, предложенная Моно:

$$\mu = \frac{\mu_m L}{K_L + L}, \quad (16)$$

где μ_m - максимальная удельная скорость роста микроорганизмов; K_L - константа полусыщения, равная концентрации субстрата, при которой скорость процесса равна $\frac{\mu_m}{2}$.

Объединение уравнений (14) и (15) в систему дает модель Моно [1]:

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = \frac{\mu_m L}{K_L + L}, \\ \frac{dL}{dt} = -\frac{1}{Y} \frac{\mu_m L}{K_L + L}, \\ X(0) = X^0, L(0) = L^0. \end{cases} \quad (17)$$

В классической модели Моно процесс роста микроорганизмов представляется несложной зависимостью, что объясняет частое применение этой модели в теории и практике культивирования микроорганизмов.

Для более точного описания динамики роста микроорганизмов предлагаются различные модификации модели Моно. В частности, в [1] рассматривается модель Герберта, учитывающая процесс самоокисления биомассы:

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = \frac{\mu_m L}{K_L + L} - bX, \\ \frac{dL}{dt} = -\frac{1}{Y} \frac{\mu_m L}{K_L + L}, \\ X(0) = X^0, L(0) = L^0, \end{cases} \quad (18)$$

где b - константа скорости самоокисления бактерий, позволяющая описывать фазу отмирания микроорганизмов. Там же рассматривается модель Халдейна, в которой учитывается процесс ингибири-

вания.

Модель Халдейна

При высоких концентрациях субстрата кинетика процесса очищения точнее описывается моделью Халдейна, в которой автором предлагается использовать следующую формулу для задания удельной скорости роста микроорганизмов:

$$\mu = \frac{\mu_m L}{K_L + L + \frac{L^2}{K_i}}. \quad (19)$$

В результате модель Халдейна записывается следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = \frac{\mu_m L}{K_L + L + \frac{L^2}{K_i}}, \\ \frac{dL}{dt} = -\frac{1}{Y} \frac{\mu_m L}{K_L + L + \frac{L^2}{K_i}}, \\ X(0) = X^0, L(0) = L^0, \end{cases} \quad (20)$$

где K_i - константа ингибиования.

Следует отметить, что при K_i стремящейся к бесконечности модель (20) совпадает с классической моделью Моно.

Заметим, что состав сточных вод, поступающих на очистку, влияет на эффективность нитрификации, так как наличие некоторых загрязнений влияет на скорость очищения водной среды. Ингибиторами нитрификации являются: медь, никель, хром, цинк и кобальт [2].

Исследование погрешности аппроксимации, устойчивости и сходимости явного метода Эйлера

Для исследования явного метода Эйлера, применяемого к системе (20), область непрерывного изменения аргумента $t \in [0, T]$ (T - количество суток) заменяется на дискретное множество точек (сетка):

$$\bar{\omega}_\tau = \{t_j | t_j = t_0 + j\tau, j = 0, 1, \dots, N\}, \tau = \frac{T}{N}. \quad (21)$$

Дифференциальная задача (20) заменяется разностной задачей:

$$\begin{cases} \frac{X_{j+1} - X_j}{\tau} = \frac{\mu_m X_j L_j}{K_L + L_j + \frac{L_j^2}{K_i}}, \\ \frac{L_{j+1} - L_j}{\tau} = -\frac{1}{Y} \frac{\mu_m X_j L_j}{K_L + L_j + \frac{L_j^2}{K_i}}, \\ X(0) = X^0, L(0) = L^0. \end{cases} \quad (22)$$

С помощью численного эксперимента убеждаемся, что схема (22) устойчива и результаты представляются в виде графиков, где X_1 , L_1 – значение микроорганизмов и концентрации субстрата соответственно при шаге τ ; X_2 , L_2 – значение микроорганизмов и концентрации субстрата соответственно при шаге $\frac{\tau}{2}$. На рис.2 наблюдается наложение графиков. Это означает, что погрешность вычислений минимальна и составляет 10^{-4} .

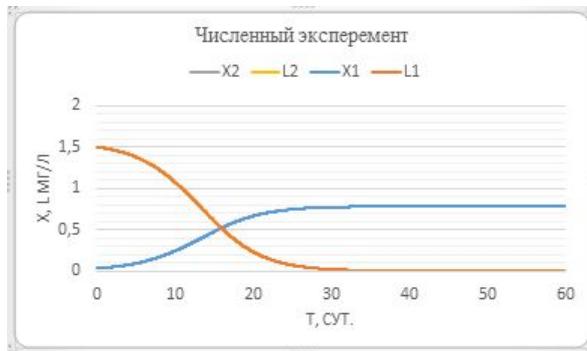


Рис. 2. Результаты расчетов явного метода Эйлера с шагом τ и $\frac{\tau}{2}$ для разностной задачи (22)

Для рассмотрения вопроса о погрешности аппроксимации, составляется функции погрешности для соответствующих уравнений разностной схемы (22). Через $\psi_1(t_j)$ и $\psi_2(t_j)$ обозначаются функции погрешности для первого и второго уравнения соответственно:

$$\begin{cases} \psi_1(t_j) = \frac{X_{j+1} - X_j}{\tau} - \frac{\mu_m X_j L_j}{K_i + L_j}, \\ \psi_2(t_j) = \frac{L_{j+1} - L_j}{\tau} + \frac{1}{Y} \frac{\mu_m X_j L_j}{K_L + L_j + \frac{L_j^2}{K_i}}. \end{cases} \quad (23)$$

Разложение функций $\psi_1(t_j)$ и $\psi_2(t_j)$ в ряд Тейлора производится

в окрестности точки t_j , в предположении, что $X, L \in C^2[0, T]$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_1(t_j) = \left(X(t_j) + \frac{dX(t_j)}{dt}\tau + \frac{d^2X(\tilde{t})}{dt^2}\frac{\tau^2}{2} - X(t_j) \right) \frac{1}{\tau} - \\ \quad - \frac{\mu_m X(t_j)L(t_j)}{K_L + L(t_j) + \frac{L(t_j)^2}{K_i}}, \\ \psi_2(t_j) = \left(L(t_j) + \frac{dL(t_j)}{dt}\tau + \frac{d^2L(\tilde{t})}{dt^2}\frac{\tau^2}{2} - L(t_j) \right) \frac{1}{\tau} + \\ \quad + \frac{1}{Y} \frac{\mu_m X(t_j)L(t_j)}{K_L + L(t_j) + \frac{L(t_j)^2}{K_i}}. \end{array} \right. \quad (24)$$

где $t_j < \tilde{t} < t_j + \tau$, $t_j < \tilde{t} < t_j + \tau$.

Таким образом получили:

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_1(t_j) = \frac{\tau}{2} \frac{d^2X(\tilde{t})}{dt^2}, \\ \psi_2(t_j) = \frac{\tau}{2} \frac{d^2L(\tilde{t})}{dt^2}. \end{array} \right. \quad (25)$$

Вектор невязки для разностной задачи (22) запишется в виде:

$$\bar{f} = \left(\frac{\tau}{2} \frac{d^2X(\tilde{t})}{dt^2}, \frac{\tau}{2} \frac{d^2L(\tilde{t})}{dt^2}, 0, 0 \right)^T. \quad (26)$$

Тогда норма вектора невязки определяется следующим образом:

$$\|\bar{f}\| = \max (\|\delta_1\|, \|\delta_2\|, \|\delta_3\|, \|\delta_4\|), \quad (27)$$

где

$$\begin{aligned} \|\delta_1 f\| &= \max_{t \in \omega_\tau} \left| \frac{\tau}{2} \frac{d^2X(t)}{dt^2} \right| = \tau \widetilde{M}_1, & \widetilde{M}_1 &= \frac{1}{2} \max_{t \in \omega_\tau} \left| \frac{d^2X(t)}{dt^2} \right| \\ \|\delta_2 f\| &= \max_{t \in \omega_\tau} \left| \frac{\tau}{2} \frac{d^2L(t)}{dt^2} \right| = \tau \widetilde{M}_2, & \widetilde{M}_2 &= \frac{1}{2} \max_{t \in \omega_\tau} \left| \frac{d^2L(t)}{dt^2} \right| \end{aligned}$$

Отсюда следует, что $\|\delta f\| = \tau \widetilde{M}_3$, где $\widetilde{M}_3 = \max(\widetilde{M}_1, \widetilde{M}_2)$. Таким образом имеет место аппроксимация порядка 1 относительно шага τ .

Тогда по теореме Лакса [3] следует, что решение разностной задачи сходится к решению дифференциальной.

Сравнение классической модели Моно и модели Халдейна

Рассмотрим зависимость роста микроорганизмов за счет потребления субстрата. В качестве лимитирующего субстрата берется глюкоза, которая в цикл биохимических превращений вовлекает фермент гексокиназа. Численные расчеты проводились при значениях

констант $\mu_m = 3,36 \text{ сут}^{-1}$, $K_L = 20 \text{ мг/л}$, $Y=0,5$, полученных экспериментально [1].

На рис.3 наблюдаются стадии роста микроорганизмов и потребления субстрата: с резким возрастанием концентрации микроорганизмов концентрация субстрата уменьшается; X_1 , L_1 – микроорганизмы и субстрат соответственно в модели Моно, X_2 , L_2 – в модели Халдейна. На примере модели Халдейна видно, что процессы протекают медленнее по сравнению с моделью Моно. Это происходит благодаря константе ингибиции. В данном случае $K_i=0,7$. При увеличении значения константы ингибиции, процессы набирают скорость и графики будут постепенно совпадать.

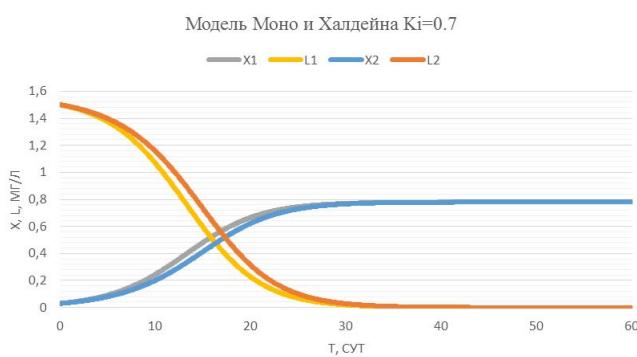


Рис. 3. Процесс потребления субстрата бактериями на протяжении 60 суток

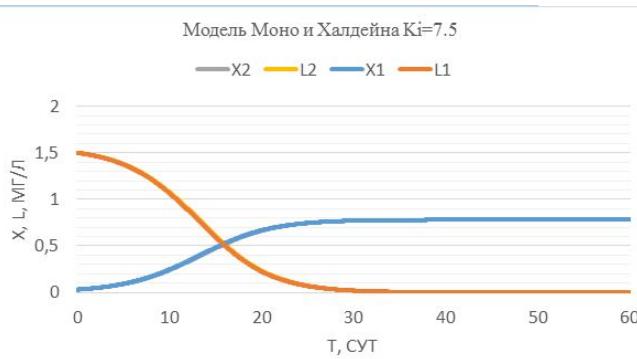


Рис. 4. Процесс потребления субстрата бактериями на протяжении 60 суток

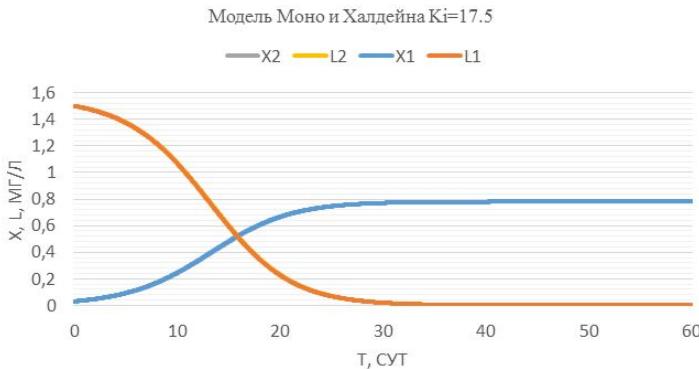


Рис. 5. Процесс потребления субстрата бактериями на протяжении 60 суток

Из анализа рис.4 и 5 следует, что при фиксированных данных и с увеличением K_i , графики начинают совпадать. Для больших концентраций модель Халдейна и модель Моно действуют следующим образом (см. рис.6, 7):

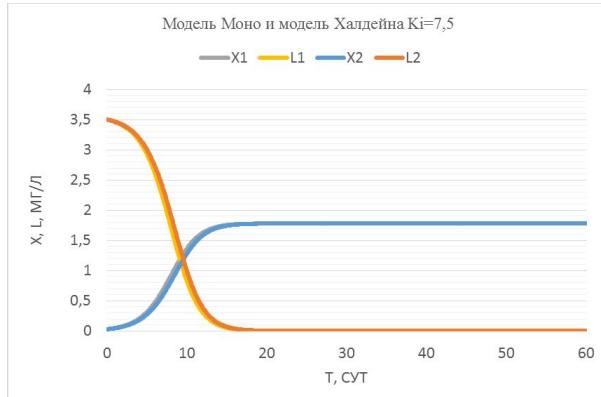


Рис. 6. Процесс потребления субстрата бактериями на протяжении 60 суток

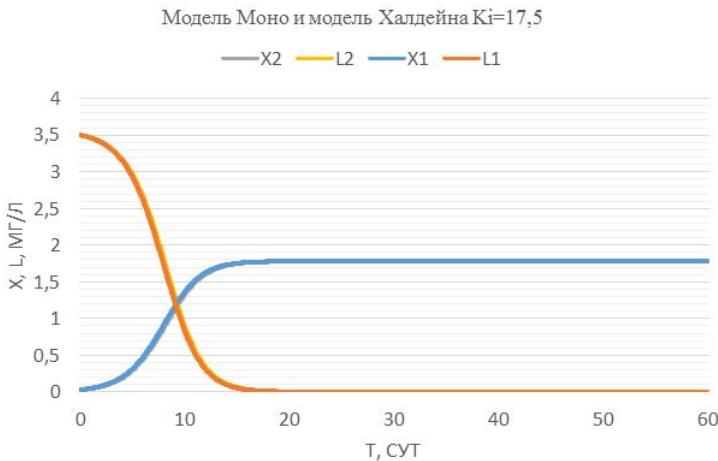


Рис. 7. Процесс потребления субстрата бактериями на протяжении 60 суток

Сравнивая рис.6 и рис.4 можно заметить, что при одной и той же константе ингибирования, но при разных начальных данных субстрата, в первом случае (рис.6) отклонение от модели Моно больше.

Заключение

В работе проводилось изучение модели Халдейна и сравнение с моделью Моно. Для исследования особенностей модели Моно использовались неявные численные методы [3]. Модель Халдейна изучалась в данной работе с помощью явного метода Эйлера [3]. Проведена оценка погрешности аппроксимации указанного метода и с помощью численного эксперимента показана его устойчивость. Подтверждена идея о том, что метод Халдейна замедляет процессы течения реакций очистки сточных вод за счет константы ингибирования K_i Модели Моно и Халдейна – точечные. Для более точного описания процесса роста бактерий и уменьшения субстрата необходимо учитывать форму водного потока (реки, ручья, озера и т.д.). Для этого в систему обыкновенных дифференциальных уравнений модели Халдейна необходимо добавить члены, содержащие пространственные координаты. Модель Халдейна замедляет течение реакций очистки сточных вод, в то время как модель Моно не учитывает данный фактор, поэтому при высоких концентрациях

субстрата правильнее использовать модель Халдейна. Следует отметить, что при K_i стремящейся к бесконечности, модель Халдейна действует аналогично модели Моно.

Литература

1. Вавилин В.А., Васильев В.Б. Математическое моделирование процессов биологической очистки сточных вод активным илом. М.: Наука, 1979. 119 с.
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.