

ПРЯМАЯ И ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ

С.П. Семенов¹, А.А. Финогенов¹

¹Югорский государственный университет, г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация

В данной работе представлена уточненная математическая модель загрязнения реки, состоящая из двух нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений для концентраций загрязнителя и растворенного кислорода и исследовано влияние биохимического коэффициента в формуле Михаэлиса – Ментена на скорость восстановления растворенного кислорода и на разложение загрязнителя. Найдено стационарное решение и численно построен фазовый портрет динамической системы. Проведена численная оценка динамики распространения загрязняющих веществ в водах реки вдоль её длины. Сформулирована обратная задача и предложен численный метод ее решения. Предложенная математическая модель и метод решения обратной задачи позволяют эффективно исследовать распространение органических загрязнений и прогнозировать их влияние на водные экосистемы. Разработанные подходы могут быть использованы для мониторинга и управления качеством воды.

Ключевые слова: математическое моделирование; органические загрязнения; растворенный кислород; нелинейные дифференциальные уравнения; обратная задача.

Введение

Промышленная, сельскохозяйственная и бытовая деятельность вносит значительный вклад в загрязнение рек и других водных объектов. Загрязненная вода негативно влияет на здоровье человека и многочисленных обитателей водных бассейнов. Особую опасность несут органические загрязнения, поскольку обладают способностью разрушать водные экосистемы, нарушать природный баланс, увеличивая рост водорослей или уменьшая уровень кислорода, приводя к смерти обитателей реки. К таким загрязнениям относятся вещества растительного, животного и химического происхождения.

Под воздействием загрязняющих веществ нарушается равновесие водной экосистемы, в ответ природа включает механизмы самоочищения, стремящиеся вернуть экосистему в первоначальное состояние. Механизмы самоочищения включают в себя процессы переноса и превращения загрязняющих веществ, протекающих под влиянием гидрофизических, биологических, биохимических факторов.

Гидрофизические факторы обеспечивают перенос и разбавление примесей вместе с течением и под влиянием турбулентного перемешивания распространение загрязнения по всему объему потока. При этом концентрация примесей постепенно снижается и при наличии самоочищения приближается к фоновой.

Самоочищение осуществляется под воздействием биологических и биохимических процессов. Биологический процесс является результатом жизнедеятельности целого комплекса водных организмов: бактерии вирусы, бактериофаги, плесени и водоросли. В результате питания микроорганизмов, дыхания и отмирания происходит самоочищение водоемов. Загрязняющие органические вещества поступают в водоем, как правило, в коллоидном состоянии. Для перевода коллоидов в истинный молекулярный раствор опять же микроорганизмы выделяют ферменты. Ферменты влияют на скорость окисления загрязнителя и его минерализацию.

Характеристикой концентрации органики и определения, какое количество кислорода требуется для полного окисления загрязнителя, содержащихся в единице объ-

ема воды (т. е. приближенно характеризует минерализацию органических веществ) служит показатель биохимической потребности в кислороде БПК.

Особенность БПК состоит в том, что ее физическая размерность равна размерности концентрации растворенного кислорода (РК), а ее величина не имеет ничего общего с реальной концентрацией растворенного кислорода [1]. Действительно, максимально возможная концентрация растворенного в воде кислорода (концентрация насыщения) при атмосферном давлении не превышает $14,6 \text{ мг/дм}^3$, в то время как БПК может принимать значения на порядок больше. Например, БПК сточных вод может составлять 200 мг/дм^3 и более, являясь универсальной характеристикой степени загрязнения воды смесью органических веществ, причем эта смесь может содержать одновременно десятки видов различных ингредиентов. В общем случае, скорость изменения концентрации органических веществ (или БПК) прямо пропорциональна произведению концентраций загрязнителя, растворенного кислорода и концентраций микроорганизмов. В случае, когда рассматривается водоем с низким содержанием кислорода, в который сбрасывается значительное количество органического вещества и при наличии в водоеме достаточного количества бактерий, можно предположить [2], что процесс минерализации загрязнителя определяется значением БПК и концентрацией растворенного в воде кислорода. В данной работе представлена уточненная математическая модель загрязнения реки, состоящая из двух нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений для концентраций загрязнителя и растворенного кислорода и исследовано влияние биохимического коэффициента в формуле Михаэлиса – Ментена на скорость восстановления растворенного кислорода и на разложение загрязнителя. Найдено стационарное решение и численно построен фазовый портрет динамической системы. Проведена численная оценка динамики распространения загрязняющих веществ в водах реки вдоль её длины. Сформулирована обратная задача и предложен численный метод ее решения.

1. Математическая модель распространения органических загрязнений

Математические модели уже давно успешно используются как для прогнозирования так и для оценки качества воды. Математические модели оценки качества воды представляются как системы нелинейных дифференциальных уравнений. Основопологающей и наиболее известной является модель Стритера и Фелпса [3], опубликованная в 1925. Модель Стритера – Фелпса связывает воедино два основных механизма, регулирующих содержание растворенного кислорода в потоке сточных вод: разложение органического вещества и реаэрацию кислорода. Авторы предположили, что биохимическое окисление протекает так же, как мономолекулярная химическая реакция, т.е. скорость окисления пропорциональна текущей концентрации органического вещества. Если обозначить $y_1(t)$ – биохимическая потребность в кислороде (концентрация загрязняющих органических веществ, выраженная в кислородных единицах); $y_2(t)$ – концентрация растворенного кислорода; k_1 и a – коэффициенты минерализации и реаэрации; Y – предельная концентрация растворенного в воде кислорода, то модель Стритера – Фелпса описывается системой уравнений:

$$\frac{dy_1}{dt} = -k_1 y_1, \quad (1)$$

$$\frac{dy_2}{dt} = -k_1 y_1 + a(Y - y_2) \quad (2)$$

с начальными условиями при $t = 0$:

$$y_1(0) = y_{10}; \quad y_2(0) = y_{20}. \quad (3)$$

Позднее потребовалось уточнение модели. Например, в работе [2] показано, что при больших дефицитах кислорода, в условиях анаэробного режима решение уравнений Фелпса – Стритера (1), (2) дает неправдоподобную картину – отрицательное значение растворенного кислорода (рис. 1). В работе [2] было выдвинуто предположение о том, что скорость изменения БПК пропорциональна не только значению БПК, но и концентрации растворенного кислорода. В этом случае процесс описывается следующей системой уравнений:

$$\frac{dy_1}{dt} = -k_1 y_1 y_2; \quad (4)$$

$$\frac{dy_2}{dt} = -k_1 y_1 y_2 + a(Y - y_2). \quad (5)$$

с начальными условиями (3). Здесь k_1 – коэффициент бимолекулярной схемы процесса.

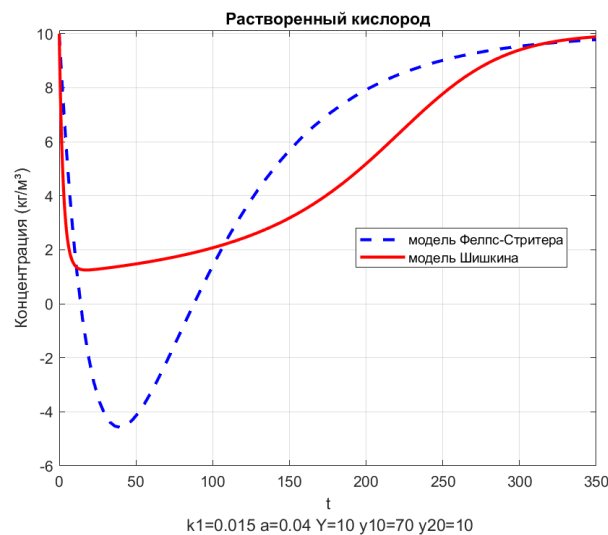


Рис. 1. Сравнение динамики изменения растворенного кислорода для разных моделей

В дальнейшем эта модель была уточнена и в нее вносились различные поправки [4–7], в частности, поскольку биохимические процессы минерализации загрязнителя относятся к разряду ферментативной кинетики, скорость изменения концентрации органического вещества разумно описывать уравнением Михаэлиса – Ментена. Таким образом, следуя [4, 5], с упрощениями до одной пространственной переменной, отсутствия диффузии и рассмотрением стационарного случая, основным предметом дальнейшего исследования является следующая система ОДУ:

$$\frac{d(vSy_1)}{dx} = -k_1 \frac{y_2}{y_2 + m} Sy_1 + q + q^* \delta(x - x^*), \quad (6)$$

$$\frac{d(vSy_2)}{dx} = -k_2 \frac{y_2}{y_2 + m} Sy_1 + a(Y - y_2) \quad (7)$$

с начальными условиями (3). Список переменных и параметров, а также единицы их измерения приведены в таблице.

Уравнение (6) включает в себя распределенное поступление загрязнителя со скоростью q , а также его разложение в результате взаимодействия с кислородом. Кроме того, учтена возможность мгновенного вброса загрязняющих веществ в точке x^* с интенсивностью q^* . Уравнение (7) представляет собой баланс растворенного в реке

Таблица

Параметры и единицы измерения		
Обозначение	Название	Ед. измерения
t	время	день
x	координата вдоль реки	м
y_1	концентрация загрязнения	кг/м ³
y_2	концентрация растворенного кислорода	кг/м ³
v	скорость течения реки	м/день
S	площадь поперечного сечения русла реки	м ²
k_1	коэффициент скорости разложения для загрязняющего вещества	1/день
k_2	коэффициент скорости дэарации для растворенного кислорода	1/день
q	интенсивность поступления загрязняющих веществ в реку	кг/м·день
m	значение растворенного кислорода, при которой достигается половина предельной концентрации в реакции Михаэлиса – Ментена	кг/м ³
a	коэффициент аэрации	м ² /день
Y	предельная концентрация растворенного кислорода	кг/м ³
q^*	интенсивность отброса загрязняющих веществ в реку	кг/день
x^*	точка сброса	м

кислорода, включает в себя скорость изменения концентрации кислорода вдоль реки за счет процессов взаимодействия с загрязнителем, а последнее слагаемое описывает добавление кислорода из атмосферы через поверхность речного потока (аэрация).

Фазовым пространством математической модели (6), (7) является первый октант $y_1 \geq 0$, $y_2 \geq 0$ плоскости (y_1, y_2) . Равновесие или точка покоя (для случая $q^* = 0$) непосредственно определяется из уравнений:

$$-k_1 \frac{y_2}{y_2 + m} S y_1 + q = 0, \quad -k_2 \frac{y_2}{y_2 + m} S y_1 + a(Y - y_2) = 0.$$

Координаты точки равновесия равны:

$$\begin{cases} y_1^* = \frac{q}{k_1 S} + \frac{amq}{ak_1 Y_1 - qk_2}, \\ y_2^* = Y - \frac{k_2 q}{k_1 a}. \end{cases} \quad (8)$$

Отсюда, в частности, следует, что при $q \geq (ak_1 Y)/(k_2)$ в первом октанте не существует решения (6), (7). В случае $q = 0$, очевидно, $y_1^* = 0$, $y_2^* = Y$.

На рис. 2 приведен фазовый портрет системы (6), (7) в предположении, что $v = S = 1$, $q = 0,02$. Точка покоя является устойчивым узлом.

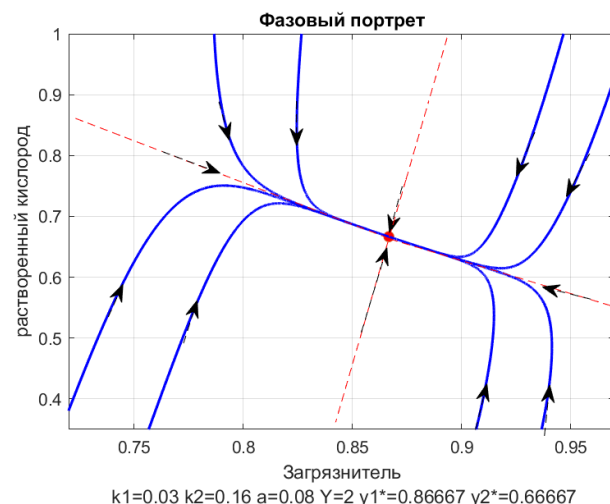


Рис. 2. Фазовый портрет модели взаимодействия загрязнителя с растворенным кислородом

Результаты численных расчетов для различных сценариев загрязнения приведены на рис. 3. Сценарий с распределенным загрязнением вдоль наблюдаемого участка реки с нулевым начальным условием представлен на рис. 3а, концентрации выходят на стационарное решение (8); рис. 3б соответствует отсутствию распределенных загрязнений, но начальное условие отлично от нуля. Рис. 3в и 3г иллюстрируют сценарии с точечным вбросом загрязняющих веществ известной интенсивности q_1 и координатой точки вброса x_1 . В трех последних случаях загрязнения практически исчезают, а растворенный кислород приходит в норму на небольших расстояниях.

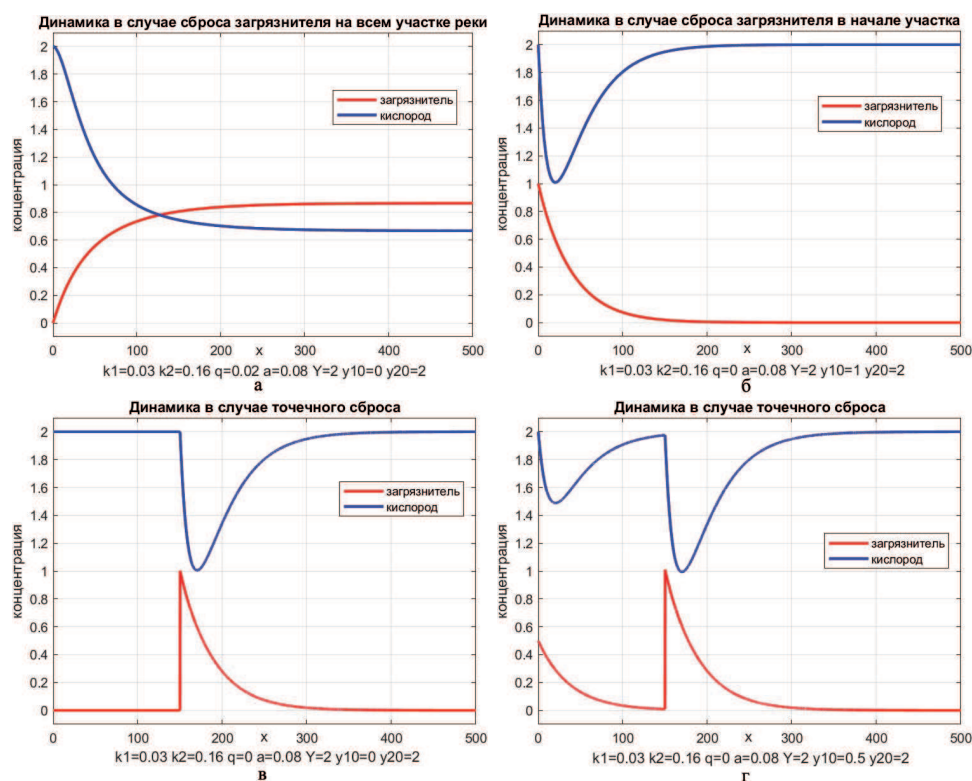


Рис. 3. Динамика загрязнителя и растворенного кислорода вдоль участка реки для различных случаев

Влияние коэффициента половинного значения кислорода m в реакции Михаэлиса – Ментена отражено на рис. 4. Уменьшение m ускоряет биохимические процессы как в начальный период вброса, так в стадии восстановления.

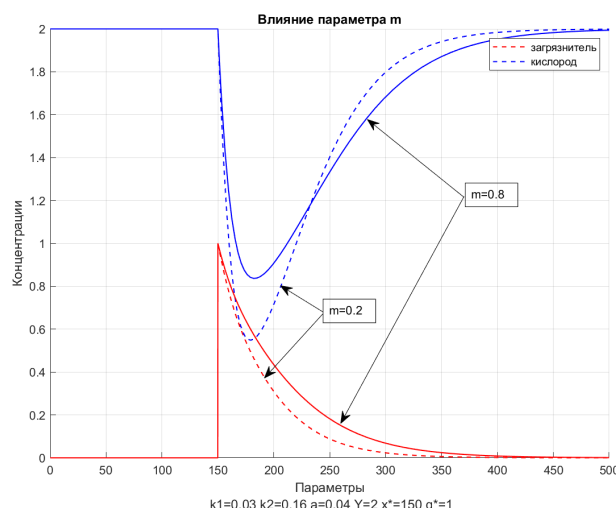


Рис. 4. Уменьшение параметра m ускоряет биохимические процессы

2. Обратная задача распространения загрязнений

Несомненный практический интерес представляет обратная задача, когда по замерам концентраций загрязняющего вещества и растворенного кислорода, требуется установить интенсивность q^* и координату x^* точечного вброса. Пусть $0 \leq x \leq L$ – наблюдаемый участок реки. В обозначениях прямой задачи (6), (7), обратную задачу можно сформулировать так.

Найти решение $y_1(t)$, $y_2(t)$ и параметры q^* , x^* следующей задачи:

$$\frac{d(vSy_1)}{dx} = -k_1 \frac{y_2}{y_2 + m} Sy_1 + q^* \delta(x - x^*), \quad (9)$$

$$\frac{d(vSy_2)}{dx} = -k_2 \frac{y_2}{y_2 + m} Sy_1 + a(Y - y_2) \quad (10)$$

с начальными условиями при $t = 0$

$$y_1(0) = 0, \quad y_2(0) = Y \quad (11)$$

и дополнительными условиями в точках замеров концентрации

$$y_1(x_i) = y_{1i}, \quad y_2(x_i) = y_{2i}, \quad i = 1, 2, \dots, r, \quad x_i \in (0, L). \quad (12)$$

Для решения обратной задачи предлагается использовать следующие шаги:

1. Выбираем начальные приближения для искомых параметров q^* и x^* .
2. Решаем прямую задачу распределения загрязнения и кислорода вдоль реки (9), (10) и вычисляем приближенные концентрации $\hat{y} = (\hat{y}_1, \hat{y}_2)$.
3. Строим целевую функцию, как сумму квадратов разности между данными измерения и вычисленными значениями в точках замеров

$$LL(q^*, x^*) = \sum_{i=1}^r ((y_{1i} - \hat{y}_1(x_i))^2 + (y_{2i} - \hat{y}_2(x_i))^2).$$

4. Искомые значениями параметров будут те, при которых достигается, с заданной точностью, минимум функции $LL(q^*, x^*)$.

Центральным местом решения обратной задачи является поиск минимума функции $LL(q^*, x^*)$. Для этой цели в данной работе использовался метод Нелдера – Мида [8], позволяющий минимизировать разницу между экспериментальными данными и результатами моделирования. Выбор этого метода обусловлен тем, что он решает задачи оптимизации без использования производных, которые обычно применяются для поиска минимума функции многих переменных, например, наискорейший градиентный спуск. Метод Нелдера – Мида особенно эффективен для задач, где целевая функция, которую необходимо минимизировать, может быть недифференцируема, зашумлена или имеет сложную структуру и хорошо работает для задач малой и средней размерности ($n \leq 10$) относительно оптимизационных параметров.

3. Результаты и обсуждение

Численные эксперименты проводились с использованием библиотеки функций Matlab. Решение прямой задачи (6), (7) было получено с помощью универсального решателя ODE45, который реализует метод Рунге – Кутты 4-го и 5-го порядков точности и отличается тем, что автоматически адаптирует шаг интеграции в процессе вычислений. Не ограничивая общности, можно считать, что в начальных условиях (3): $y_1(0) = 0$; $y_2(0) = Y$. Для решения дифференциального уравнения с дельта-функцией Дирака в MATLAB можно использовать следующее соображение: Решить систему на отрезке от точки выброса x^* (место, где находится дельта Дирака) до конца наблюдаемого участка, с начальными условиями $y_1(x^*) = q^*$; $y_2(x^*) = Y$. Затем приписать слева на промежутке $[0, x^*]$ значение для $y_1(x) = 0$, $y_2(x) = Y$.

Результаты расчетов разных сценариев приведены на рис. 3 и 4. Для исследования обратной задачи был построен модельный пример точечного сброса в точке с координатами $x^* = 150$ и интенсивностью $q^* = 1$. Точки замера были равномерно распределены на наблюдаемом участке реки $x_i \in (0, L)$, $i = 1, 2, \dots, r$. На рис. 5 приведено построение модельного примера, в котором точки замера выделены маркером, $r = 10$.

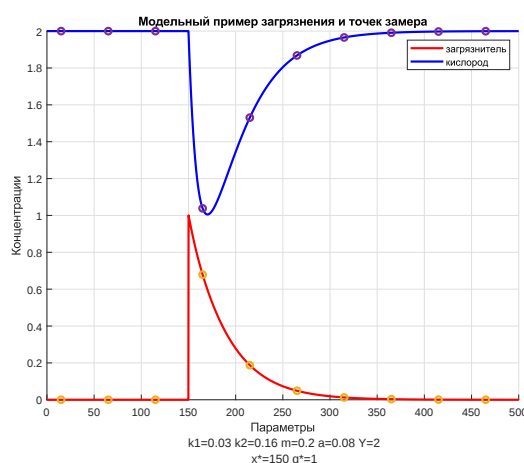


Рис. 5. Модельный пример с точками замера

Поиск минимума функции $LL(q^*, x^*)$ решающий обратную задачу, осуществлялся с помощью функции `fminsearch` из библиотеки Matlab. Указанная функция реализует симплексный метод Нелдера – Мида, для ее использования достаточно ввести целевую функцию и начальное приближение для искомых значений параметров q^* и x^* , которое интерпретируется как точка на плоскости параметров (q^*, x^*) . Затем начальная точка достраивается до треугольника (симплекс) и, далее, на каждом шаге

работы алгоритма Нелдера – Мида этот треугольник трансформируется: отражается, расширяется, сжимается или уменьшается, постепенно «сужаясь» вокруг точки, близкой к минимуму целевой функции [8].

Алгоритм завершает работу, если выполняется хотя бы одно из следующих условий:

1. Все вершины симплекса сближаются, и наибольшее расстояние между ними становится меньше параметра TolX (по умолчанию: TolX= 10^{-4}).
2. Разница между максимальным и минимальным значением функции на вершинах симплекса становится меньше параметра TolFun (по умолчанию: TolFun= 10^{-4}).
3. Если число итераций достигает максимального значения, указанного в опции MaxIter (по умолчанию: MaxIter= $200 \cdot n$, где n – размерность задачи).
4. Достигнут лимит вычислений функции: Если число вызовов целевой функции достигает максимального значения, указанного в опции MaxFunEvals (по умолчанию: MaxFunEvals= $200 \cdot n$).

Метод Нелдера – Мида достаточно просто реализуется и широко применяется в прикладных задачах, например, в задачах машинного обучения, но для него не существует теорем сходимости – алгоритм может расходиться даже на гладких функциях. Кроме того, алгоритм может остановиться преждевременно из-за: плохого выбора начальной точки (q_0, x_0) : попадания в локальный минимум, если целевая функция имеет сложную форму; недостаточного числа итераций (можно увеличить MaxIter) и слишком жёстких критериев TolX или TolFun, что тоже может помешать сходимости. Решение обратной задачи для модельного примера приведено на рис. 6. В качестве начальной точки были взяты значения $q = 0,5$ и $x_0 = 100$ точка. Алгоритму для остановки (расстояние между вершинами симплекса меньше TolX) понадобилось 50 итераций, найденные значения q и x_0 приведены в подписи к рис. 6.

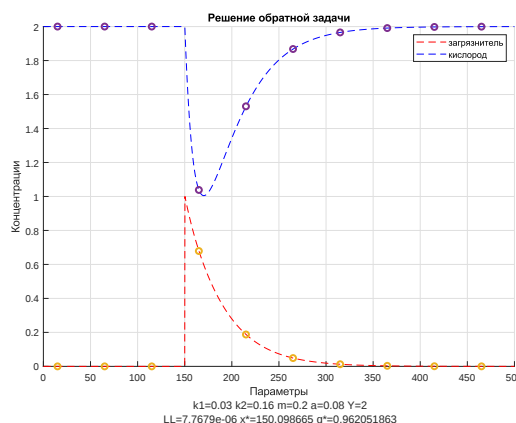


Рис. 6. Решение обратной задачи для модельного примера

В результате решения обратной задачи для модельного примера интенсивность и координата источника были восстановлены с высокой точностью. Очевидно, правильным решением будет выбирать в качестве начального приближения координаты (x^*, q^*) первой ненулевой точки замера.

Заключение

Предложенная математическая модель (6), (7) и метод решения обратной задачи позволяют эффективно исследовать распространение органических загрязнений и прогнозировать их влияние на водные экосистемы. Разработанные подходы могут быть использованы для мониторинга и управления качеством воды.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «Аналитическое и численное исследование обратных задач об определении параметров источников атмосферного или водного загрязнения и (или) параметров среды», код темы: FENG-2023-0004).

Литература

1. Готовцев, А.В. Определение биохимической потребности в кислороде и скорости окисления на основе модифицированной системы Стритера – Фелпса / А.В. Готовцев // Доклады академии наук СССР. – 2015. – Т. 460, № 6. – С. 713–715.
2. Дружинин, Н.И. Математическое моделирование и прогнозирование загрязнения поверхностных вод суши / Н.И. Дружинин, А.И. Шишкин. – Л.: Гидрометеиздат, 1989.
3. Streeter, H.W. A Study of the Pollution and Natural Purification of the Ohio River / H.W. Streeter, E.B. Phelps // US Public Health Service, Public Health Bulletin. – 1925. – V. 146, P. 1–75.
4. Chapra, S.C. Surface Water Quality Modeling / S.C. Chapra. – New York: McGraw-Hill, 1997.
5. Pimpunchat, B. Modelling River Pollution and Removal by Aeration / B. Pimpunchat, W.L. Sweatman, W. Triampo, G.C. Wake, A. Parshotam // International Congress on Modelling and Simulation. Land, Water and Environmental Management: Integrated Systems for Sustainability. – 2007. – P. 2431–2437.
6. Dobbins, W.E. BOD and Oxygen Relationships in Streams / W.E. Dobbins // Journal Sanitary Engineering Division. – 1964. – V. 90. – P. 53–78.
7. Шабалин, В.В. Распространение загрязнения в реках при естественной аэрации / В.В. Шабалин // Международный научно-исследовательский журнал. – 2022. – Т. 11, № 125. – С. 1–9.
8. Lagarias, J.C. Convergence Properties of the Nelder-Mead Simplex Method in Low Dimensions / J.C. Lagarias, J.A. Reeds, M.H. Wright, P.E. Wright // SIAM Journal of Optimization. – 1998. – V. 9, № 1. – P. 112–147.

Сергей Петрович Семенов, кандидат физико-математических наук, доцент, «Инженерная школа цифровых технологий», Югорский государственный университет (г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация), ssp@ugrasu.ru.

Антон Анатольевич Финогенов, кандидат физико-математических наук, «Инженерная школа цифровых технологий», Югорский государственный университет (г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация), a_finogenov@ugrasu.ru.

Поступила в редакцию 14 февраля 2025 г.

MSC 65L09, 65L08, 37C60

DOI: 10.14529/mmp250204

DIRECT AND INVERSE PROBLEM OF ORGANIC POLLUTION PROPAGATION

S.P. Semenov¹, A.A. Finigenov¹

¹Yugra State University, Khanty-Mansiysk, Russian Federation

E-mail: ssp@ugrasu.ru, a_finogenov@ugrasu.ru

This paper provides a refined mathematical model of the river pollution consisting of two nonlinear ordinary differential equations for pollutant and dissolved oxygen concentra-

tions and studies of the impact of the biochemical coefficient in the Michaelis-Menten formula on the rate of dissolved oxygen recovery and pollutant decomposition. A stationary solution is found and a phase portrait of the dynamic system is constructed numerically. A numerical assessment of the dynamics of pollutant distribution in river waters along its length is carried out. An inverse problem is stated and a numerical method for its solving is proposed. The proposed mathematical model and the method for solving the inverse problem allow to effectively study the distribution of organic pollutants and predict their impact on aquatic ecosystems. The developed approaches can be used for monitoring and managing water quality.

Keywords: mathematical modelling; organic pollutant; dissolved oxygen; nonlinear differential equation; inverse problem.

References

1. Gotovtsev A.V. Determination of Biochemical Oxygen Demand and Oxidation Rate Based on the Modified Streeter–Phelps System. *Doklady Earth Sciences*, 2015, vol. 460, no. 2, pp. 195–197. DOI: 10.1134/S1028334X15020191
2. Druzhinin N.I., Shishkin A.I. *Matematicheskoe modelirovanie i prognozirovanie zagryazneniya poverhnostnykh vod sushi* [Mathematical Modeling and Forecasting of Pollution in Surface Waters of Land]. Leningrad, Gidrometeoizdat, 1989. (in Russian)
3. Streeter H.W., Phelps E.B. A Study of the Pollution and Natural Purification of the Ohio River. *US Public Health Service, Public Health Bulletin*, 1925, vol. 146, pp. 1–75.
4. Chapra S.C. *Surface Water Quality Modeling*. New York, McGraw-Hill, 1997.
5. Pimpunchat B., Sweatman W.L., Triampo W., Wake G.C., Parshotam A. Modelling River Pollution and Removal by Aeration. *International Congress on Modelling and Simulation. Land, Water and Environmental Management: Integrated Systems for Sustainability*, 2007, pp. 2431–2437.
6. Dobbins W.E. BOD and Oxygen Relationships in Streams. *Journal Sanitary Engineering Division*, 1964, vol. 90, pp. 53–78. DOI: 10.1061/JSEDAI.0000495
7. Shabalin V.V. Pollution Propagation in Rivers Under Natural Aeration. *International Research Journal*, 2022, vol. 11, no. 125, pp. 1–9. DOI: 10.23670/IRJ.2022.125.50.
8. Lagarias J.C., Reeds J.A., Wright M.H., Wright P.E. Convergence Properties of the Nelder-Mead Simplex Method in Low Dimensions. *SIAM Journal of Optimization*, 1998, vol. 9, no. 1, pp. 112–147. DOI: 10.1137/S1052623496303470

Received February 14, 2025