

ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА

УДК 519.6:517:958:533.7

М.Д. Михайлов, В.В. Трапп

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА САМООЧИЩЕНИЯ ЗАГРЯЗНЕННОГО УЧАСТКА РЕКИ

Главной задачей моделирования водных экосистем является получение адекватного количественного представления о биотическом круговороте и взаимодействии компонент экосистемы в соответствии с общими законами сохранения и биологическими закономерностями.

Неблагоприятная экологическая ситуация, сложившаяся в Томской и ряде других областей, ведет к актуализации проблемы загрязнения водных объектов в результате сброса в них сточных вод от промышленных предприятий и населенных пунктов.

Сегодня необходимо создать экологические нормативы и определить пути сохранения и усиления самоочищающихся механизмов и функций природных систем. Для успешного планирования, оперативного управления и контроля над качеством водной среды, необходимо комплексное описание гидродинамических, гидрохимических и гидробиологических процессов в водоемах. Такое описание проводится с использованием методов математического моделирования, которые позволяют количественно описывать круговорот и взаимодействие компонент, входящих в экосистему загрязненного участка реки.

Целью данной работы является изучение математических моделей, описывающих процесс самоочищения загрязненного участка реки и применение численных методов к решению такого рода задач.

Предлагаются модификации моделей Кемпа и более сложной модели, предложенной в работе [1].

Модификации моделей

Начнем с модификации модели Кемпа [2]. В модели описывается взаимодействие между РК (растворенный кислород), который является одним из основных показателей жизнедеятельности водной среды, и БПК(биохимическое потребление кислорода), за счет которого, в основном, уменьшается содержание РК в реке и, следовательно, ухудшается качество воды. Данная модель учитывает постоянную скорость ухода БПК за счет осаждения или адсорбции, скорость поступления РК за счет фотосинтеза, осуществляющего водорослями, а также скорость поступления БПК в проточ-

ную систему за счет вымывания из придонных иловых отложений.

Модель Кемпа представляет собой задачу Коши для ОДУ первого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{dD}{dt} &= k_1 L - k_2 D - P', \\ \frac{dL}{dt} &= -k_1 L - k_3 L + p, \\ D(0) &= D_0, \quad L(0) = L_0. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Модификация модели (1.1) на двумерный случай осуществлялась вводом в нее операторов конвективного

$\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}$ и диффузационного $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$

членов.

В результате получается система двух дифференциальных уравнений в частных производных:

$$\begin{aligned} \frac{\partial D}{\partial t} + W_D \cdot \left(\frac{\partial D}{\partial x} + \frac{\partial D}{\partial y} \right) &= k_1 \cdot L - k_2 \cdot D - P' + D_D \cdot \left(\frac{\partial^2 D}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 D}{\partial y^2} \right), \\ \frac{\partial L}{\partial t} + W_L \cdot \left(\frac{\partial L}{\partial x} + \frac{\partial L}{\partial y} \right) &= -k_1 \cdot L - k_3 \cdot L + p + D_L \cdot \left(\frac{\partial^2 L}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 L}{\partial y^2} \right) \end{aligned} \quad (1.2)$$

с соответствующими начальными

$$L(x, y, 0) = L_0, \quad D(x, y, 0) = D_0 \quad (1.3)$$

и граничными условиями

$$\begin{aligned} \frac{\partial D}{\partial x} \Big|_{x=0} &= \frac{\partial D}{\partial x} \Big|_{x=l_x} = 0, \quad \frac{\partial D}{\partial y} \Big|_{y=0} = \frac{\partial D}{\partial y} \Big|_{y=l_y} = 0, \\ \frac{\partial L}{\partial x} \Big|_{x=0} &= \frac{\partial L}{\partial x} \Big|_{x=l_x} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial y} \Big|_{y=0} = \frac{\partial L}{\partial y} \Big|_{y=l_y} = 0. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Здесь W_D , W_L коэффициенты конвекции дефицита кислорода и концентрации органического вещества соответственно, а D_D , D_L - коэффициенты диффузии дефицита кислорода и концентрации органического вещества. Будем рассматривать случай, когда $W_D = W_L = W$, $D_D = D_L$.

Опишем вторую, более сложную, модель. В ней учитывается круговорот органических веществ, концентрация растворенного кислорода, интенсивность солнечной радиации, круговорот

биогенных элементов, концентрация фитопланктона и моллюсков [1].

Математическая модель описывается следующей системой ОДУ:

$$\begin{aligned} \frac{dL_{org}}{dt} &= A + sc - A1 - swd - k \cdot L_{org} \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rql}}) , \\ \frac{dL_{is}}{dt} &= -k \cdot L_{is} , \\ \frac{dL_{st}}{dt} &= -k \cdot L_{st} \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rql}}) , \\ \frac{dg}{dt} &= s\delta + ag \cdot k \cdot L_{org} \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rql}}) - \alpha \cdot g \cdot \varphi \cdot B_f , \\ \frac{dq}{dt} &= \alpha_1 \cdot (Q - q) + \alpha_2 \cdot P_f - sqn - \\ &\quad - \alpha_2 \cdot k \cdot L_{org} \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rql}}) - c_f \cdot B_f \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rnf}}) - \\ &\quad - c_m \cdot B_m \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rqm}}) , \\ \frac{dB_f}{dt} &= P_f - sc - swf - c_f \cdot B_f \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rnf}}) , \\ \frac{dB_m}{dt} &= \frac{R^*}{U} - T - sm \cdot B_m \cdot \frac{R - R^*}{R}, \end{aligned} \quad (1.5)$$

с начальными условиями

$$\begin{aligned} L_{org}(0) &= L_{org_0} , \quad L_{is}(0) = L_{is_0} , \quad L_{st}(0) = L_{st_0} , \\ g(0) &= g_0 , \quad q(0) = q_0 , \\ B_f(0) &= B_{f_0} , \quad B_m(0) = B_{m_0} . \end{aligned} \quad (1.6)$$

Здесь L_{org} - концентрация органического вещества, L_{is} - концентрация исходного органического вещества, L_{st} - концентрация стойкой фракции, q - концентрация растворенного в воде кислорода, g - концентрация биогенных элементов, B_m - концентрация биомассы моллюсков, B_f - концентрация биомассы фитопланктона, A - скорость поступления органического вещества со стоком, sc - скорость отмирания фитопланктона, $A1$ - скорость осаждения на дно органического вещества, $k \cdot L_{org} \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rql}})$ - скорость разложения органического вещества, sd -скорость пополнения извне запаса биогенных элементов,

$ag \cdot k \cdot L_{org} \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rql}})$ - скорость поступления биогенных элементов из разлагающегося вещества, $\alpha \cdot g \cdot \varphi \cdot B_f$ -скорость потребления биогенных элементов фитопланктоном, $\alpha_1 \cdot (Q - q)$ -скорость обмена кислородом между водой и атмосферой.

Для модификации модели введем операторы

конвективного $\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}$ и диффузионного

$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ членов, получая двумерную краевую задачу, описываемую системой из семи дифференциальных уравнений в частных производных:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L_{org}}{\partial t} + W \left(\frac{\partial L_{org}}{\partial x} + \frac{\partial L_{org}}{\partial y} \right) &= D_D \left(\frac{\partial^2 L_{org}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 L_{org}}{\partial y^2} \right) + \\ &\quad + A + sc - A1 - swd - k \cdot L_{org} \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rql}}) , \\ \frac{\partial L_{is}}{\partial t} + W \left(\frac{\partial L_{is}}{\partial x} + \frac{\partial L_{is}}{\partial y} \right) &= D_D \left(\frac{\partial^2 L_{is}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 L_{is}}{\partial y^2} \right) - k \cdot L_{is} , \\ \frac{\partial L_{st}}{\partial t} + W \left(\frac{\partial L_{st}}{\partial x} + \frac{\partial L_{st}}{\partial y} \right) &= D_D \left(\frac{\partial^2 L_{st}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 L_{st}}{\partial y^2} \right) - \\ &\quad - k \cdot L_{st} \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rql}}) , \\ \frac{\partial g}{\partial t} + W \left(\frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial y} \right) &= D_D \left(\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} \right) + s\delta + \\ &\quad + ag \cdot k \cdot L_{org} \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rql}}) - \alpha \cdot g \cdot \varphi \cdot B_f , \\ \frac{\partial q}{\partial t} + W \left(\frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial q}{\partial y} \right) &= D_D \left(\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial y^2} \right) + \alpha_1 \cdot (Q - q) + \\ &\quad + \alpha_2 \cdot P_f - sqn - \alpha_2 \cdot k \cdot L_{org} \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rql}}) - \\ &\quad - c_f \cdot B_f \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rnf}}) - c_m \cdot B_m \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rqm}}) , \\ \frac{\partial B_f}{\partial t} + W \left(\frac{\partial B_f}{\partial x} + \frac{\partial B_f}{\partial y} \right) &= D_D \left(\frac{\partial^2 B_f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 B_f}{\partial y^2} \right) + \\ &\quad + P_f - sc - swf - c_f \cdot B_f \cdot (1 - e^{-\frac{q}{rnf}}) , \\ \frac{\partial B_m}{\partial t} + W \left(\frac{\partial B_m}{\partial x} + \frac{\partial B_m}{\partial y} \right) &= D_D \left(\frac{\partial^2 B_m}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 B_m}{\partial y^2} \right) + \\ &\quad + \frac{R^*}{U} - T - sm \cdot B_m \cdot \frac{R - R^*}{R} \end{aligned} \quad (1.7)$$

с соответствующими начальными

$$\begin{aligned} L_{org}(x, y, 0) &= L_{org_0} , \quad L_{is}(x, y, 0) = L_{is_0} , \\ L_{st}(x, y, 0) &= L_{st_0} , \quad g(x, y, 0) = g_0 , \\ q(x, y, 0) &= q_0 , \quad B_f(x, y, 0) = B_{f_0} , \end{aligned} \quad (1.8)$$

$$B_m(x, y, 0) = B_{m_0}$$

и граничными условиями

$$\left. \frac{\partial L_{org}}{\partial z} \right|_{z=0} = \left. \frac{\partial L_{org}}{\partial z} \right|_{z=l_z} = 0 ,$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial L_{is}}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\partial L_{is}}{\partial z} \Big|_{z=l_z} = 0, \quad \frac{\partial L_{st}}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\partial L_{st}}{\partial z} \Big|_{z=l_z} = 0, \\
& \frac{\partial g}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\partial g}{\partial z} \Big|_{z=l_z} = 0, \quad \frac{\partial q}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\partial q}{\partial z} \Big|_{z=l_z} = 0, \\
& \frac{\partial B_f}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\partial B_f}{\partial z} \Big|_{z=l_z} = 0, \\
& \frac{\partial B_m}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\partial B_m}{\partial z} \Big|_{z=l_z} = 0, \quad z = (x, y).
\end{aligned} \tag{1.9}$$

Численная реализация двумерных моделей

Для решения задач (1.2)-(1.4), (1.7)-(1.9) используется метод дробных шагов и неявная разностная схема переменных направлений [3]. Область, в которой ищется решение, покрывается равномерной сеткой с шагами h_x, h_y . Для реализации схемы переменных направлений наряду со значениями искомой сеточной вектор-функции $\bar{U}(x, t)$ на слоях n и $n+1$, которые обозначим \bar{U}^n и \bar{U}^{n+1} соответственно, вводится промежуточное значение, т.е. значения \bar{U} при $t=t_n+\tau/2$. Переход от слоя n к слою $n+1$ совершается в два этапа с шагом $\tau/2$. Схема для расчетов:

$$\frac{\bar{U}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{U}^n}{0.5\tau} + W(\Delta_1 \bar{U}^{n+\frac{1}{2}} + \Delta_2 \bar{U}^n) = \tag{2.1}$$

$$\begin{aligned}
& = D_D \cdot \Lambda_1 \bar{U}^{n+\frac{1}{2}} + D_D \cdot \Lambda_2 \bar{U}^n + \bar{\varphi}^n, \\
& \frac{\bar{U}^{n+1} - \bar{U}^{n+\frac{1}{2}}}{0.5\tau} + W(\Delta_1 \bar{U}^{n+\frac{1}{2}} + \Delta_2 \bar{U}^{n+1}) = \tag{2.2}
\end{aligned}$$

$$= D_D \cdot \Lambda_1 \bar{U}^{n+\frac{1}{2}} + D_D \cdot \Lambda_2 \bar{U}^{n+1} + \bar{\varphi}^n,$$

где

$$\Delta_1 f^n = \frac{f_{j,k}^n - f_{j-1,k}^n}{h_x}, \quad \Delta_2 f^n = \frac{f_{j,k}^n - f_{j,k-1}^n}{h_y},$$

$$\Lambda_1 f^n = \frac{f_{j+1,k}^n - 2f_{j,k}^n + f_{j-1,k}^n}{h_x^2},$$

$$\Lambda_2 f^n = \frac{f_{j,k+1}^n - 2f_{j,k}^n + f_{j,k-1}^n}{h_y^2},$$

(2.3)

$\bar{\varphi}^n$ - значения правых частей уравнений на слое n в точке (x_j, y_k) .

Для системы (1.1) - $\bar{U} = (D, L)^T$, для системы (1.7) - $\bar{U} = (L_{org}, L_{is}, L_{st}, g, q, B_f, B_m)^T$.

Схема (2.1) неявна по направлению x и явна по y , схема (2.2) явна по x и неявна по y .

Запишем разностную аппроксимацию для краевых условий для задачи (1.2) – (1.4)

$$D(x, y, 0) = D_0(x, y),$$

$$L(x, y, 0) = L_0(x, y), \quad (x, y) \in \varpi_h \tag{2.4}$$

$$D_{j,0}^{n+1} = D_{j,1}^n, \quad L_{j,0}^{n+1} = L_{j,1}^n$$

и для задачи (1.7) – (1.9)

$$L_{org}(x, y, 0) = L_{org,0}(x, y),$$

$$L_{is}(x, y, 0) = L_{is,0}(x, y),$$

$$g(x, y, 0) = g_0(x, y), \quad q(x, y, 0) = q_0(x, y),$$

$$B_f(x, y, 0) = B_{f,0}(x, y),$$

$$B_m(x, y, 0) = B_{m,0}(x, y), \quad (x, y) \in \varpi_h \tag{2.5}$$

$$L_{org,j,0}^{n+1} = L_{org,j,1}^n, \quad L_{is,j,0}^{n+1} = L_{is,j,1}^n,$$

$$L_{st,j,0}^{n+1} = L_{st,j,1}^n$$

$$g_{j,0}^{n+1} = g_{j,1}^n, \quad q_{j,0}^{n+1} = q_{j,1}^n,$$

$$B_{f,j,0}^{n+1} = B_{f,j,1}^n, \quad B_{m,j,0}^{n+1} = B_{m,j,1}^n.$$

Реализация схемы переменных направлений основана на последовательном определении значений $\bar{U}^{n+\frac{1}{2}}$ и \bar{U}^{n+1} . Решение находится методом прогонки сначала по одному направлению (по переменной x), потом по другому направлению (по переменной y).

Для исследования вопросов аппроксимации, устойчивости и сходимости численного решения задач (1.2)-(1.4), (1.7)-(1.9) использовалась теория, предложенная в [4]. Согласно этой теории, рассматриваемую схему можно записать в операторно-разностном виде:

$$\begin{aligned}
& \left(E + \frac{\tau}{2} A^{(1)} \right) \bar{U}^{n+\frac{1}{2}} = \left(E - \frac{\tau}{2} A^{(2)} \right) \bar{U}^n + \tau \cdot f_1^n, \\
& \left(E + \frac{\tau}{2} A^{(2)} \right) \bar{U}^{n+1} = \left(E - \frac{\tau}{2} A^{(1)} \right) \bar{U}^{n+\frac{1}{2}} + \tau \cdot f_2^n, \\
& A^{(\alpha)} = \Delta_\alpha + \Lambda_\alpha, \quad \alpha = 1, 2.
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Сформулируем условия устойчивости схемы переменных направлений в виде теоремы.

Теорема. Пусть в схеме (2.6) постоянные операторы $A^{(\alpha)} \geq 0$, $\alpha = 1, 2$. Тогда для разностного решения имеет место следующая оценка устойчивости по начальным данным и правой части:

$$\left\| \left(E + \frac{\tau}{2} A^{(2)} \right) \bar{U}^{n+1} \right\| \leq \left\| \left(E + \frac{\tau}{2} A^{(2)} \right) \bar{U}^0 \right\| + \sum_{k=0}^n \left(\|f_1^k\| + \|f_2^k\| \right) \tag{2.7}$$

Доказательство теоремы рассмотрено в [4].

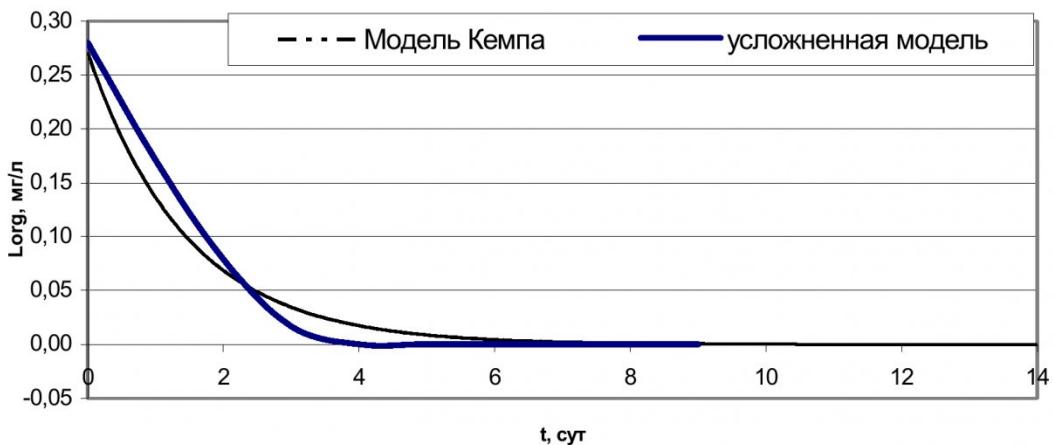


Рис. 1. Изменение концентрации органического вещества (точечная модель)

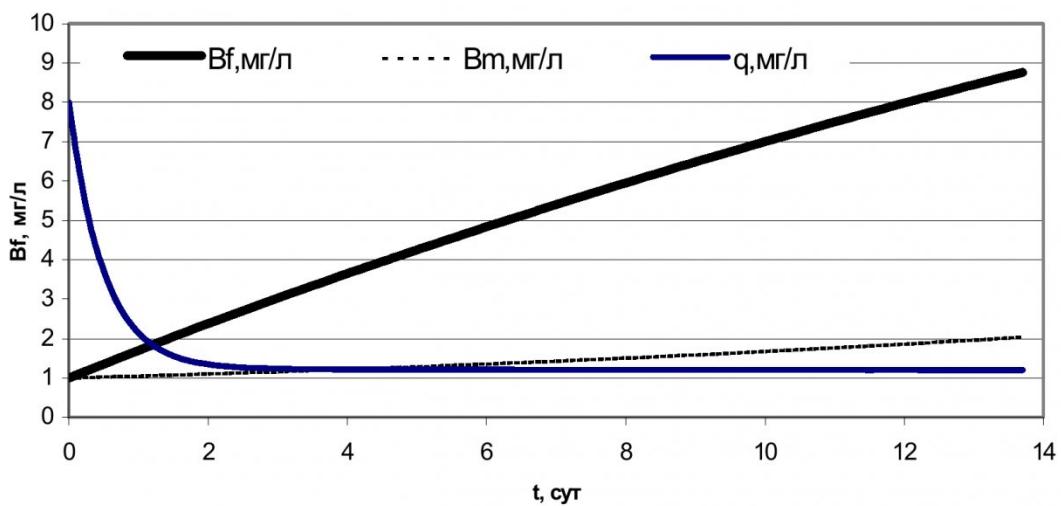


Рис. 2. Изменение концентрации биомассы фитопланктона, биомассы моллюсков, растворенного в воде кислорода (точечная модель)

Схема переменных направлений имеет второй порядок аппроксимации по времени и по пространству, однако, использование мягких горничных условий дает суммарную аппроксимацию первого порядка по времени и по пространству. Тогда, согласно теореме Лакса, имеет место сходимость [5].

Обсуждение результатов

Для численной реализации точечных моделей (1.1), (1.5)-(1.6) применялся неявный метод Эйлера. В качестве органического вещества рассматривался фенол, т.к. он является основным из загрязнителей р. Томь. Известно, что предельно допустимая концентрация (ПДК) фенола составляет 0,001 мг/л [6]. Начальная концентрация

$$L_0 = 0,28 \text{ мг/л}, \quad D_0 = 0 \text{ мг/л},$$

$$L_{org0} = 0,28 \text{ мг/л}, \quad (3.1)$$

$$L_{is0} = 1 \text{ мг/л}, \quad L_{st0} = 1 \text{ мг/л}, \quad g_0 = 1 \text{ мг/л},$$

$$q = 8 \text{ мг/л}, \quad B_{f0} = 1 \text{ мг/л}, \quad B_{m0} = 1 \text{ мг/л}.$$

Расчеты проводились для 14 суток. Согласно полученным результатам (рис.1), по модели Кемпа (1.1) ПДК фенола достигается на 6 сутки, а полное очищение участка реки от загрязнителя достигается к концу 6 суток. По второй, более сложной модели (1.7), ПДК достигается к концу 3 суток, полное очищение происходит на 4 сутки.

Для оценки работы моделей также проводились расчеты при загрязнении 30 мг/л. В этом случае очищение произошло быстрее по модели Кемпа (на 8 сутки), а по модели (1.5)-(1.6) на 8 сутки концентрация органического вещества составляла 27,2 мг/л. Дефицит кислорода (модель (1.1)) достигает наибольшего значения - 0,027 мг/л к концу 1 суток, а затем падает до нуля.

На рис.2 показано изменение концентрации для q (растворенного в воде кислорода), B_n (биомассы моллюсков), B_f (биомассы фитопланктона).

На рис.3 - изменение концентрации для L_{is} (исходного органического вещества), L_{st} (стойкой фракции), g (биогенных элементов).

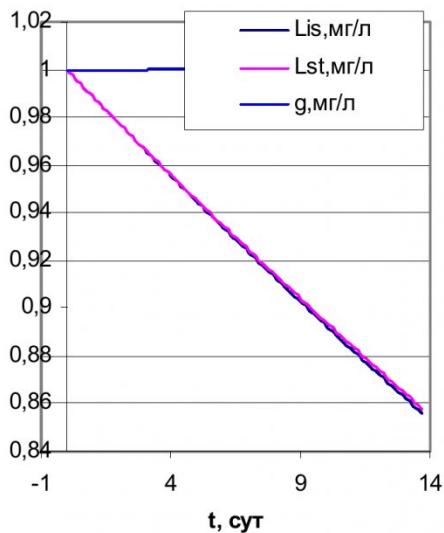


Рис. 3. Изменение концентраций исходного органического вещества, стойкой фракции и биогенных элементов (точечная модель)

Из рис. 2 видим, что биомасса фитопланктона и биомасса моллюсков растут; на 14 сутки биомасса фитопланктона достигает 8,76 мг/л, моллюсков - 2,03 мг/л. Концентрация растворенного в воде кислорода достигает 1,2 мг/л.

Концентрация исходного органического вещества падает на 14 сутки до 0,856 мг/л, концентрация стойкой фракции на 14 сутки равна 0,8578 мг/л. Изменение концентрации биогенных элементов почти не происходит.

Наряду с точечными моделями и их модификациями на двумерных случай, описанными в п.1, п.2, проводились расчеты для модифицированных моделей (1.1), (1.5)-(1.6) на одномерный случай. Задача самоочищения решалась с помощью неявной схемы первого порядка по h (шаг по пространству) и первого порядка по τ (шаг по времени).

Рассматривался участок реки длиной 100 км. Скорость течения реки бралась равной 120 км/сут, а коэффициент диффузии - 2,5 км²/сут. Начальное загрязнение $L_0 = L_{org0} = 0.28$ мг/л, начальное значение стойкой фракции $L_{st0} = 1$ мг/л на первых 4 км реки, на остальном участке они полагались равными нулю. Остальные параметры задавались равномерно на всем рассматриваемом участке.

На рис. 8-11 показано поведение L_{org} , L_{st} , L ,

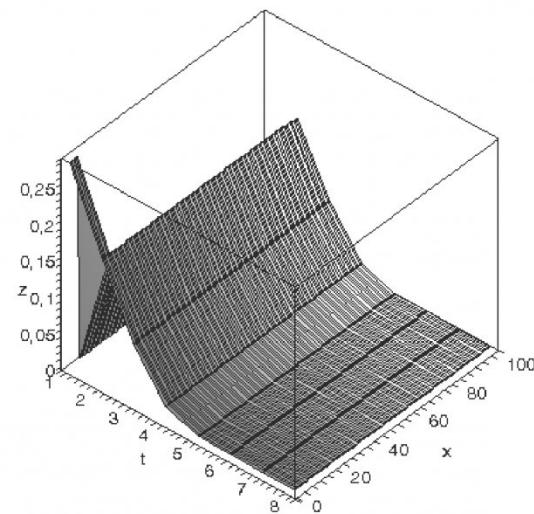


Рис. 4. Концентрация органического вещества (L_{org} , мг/л) (одномерная модель) (x , км; t , сут)

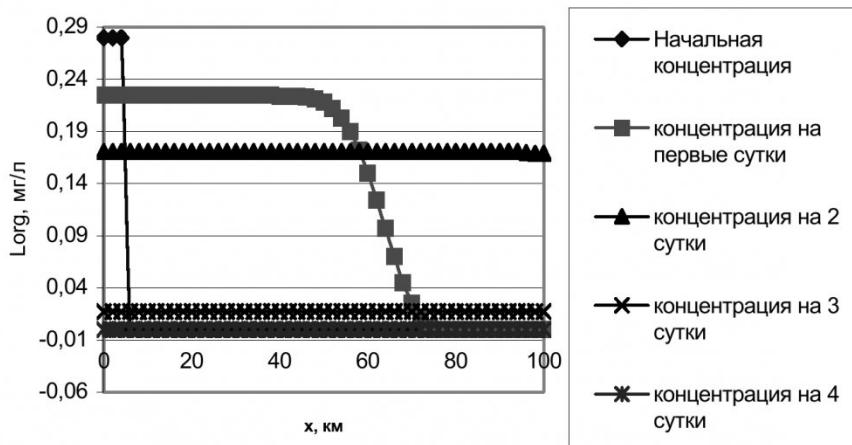


Рис. 5. Изменение концентрации органического вещества (одномерная модель)

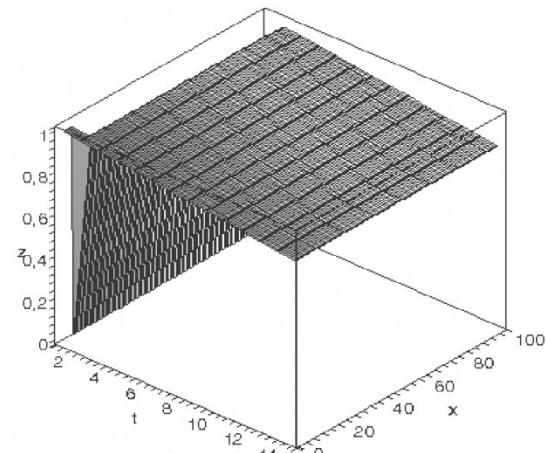


Рис. 6. Изменение концентрации стойкой фракции (L_{st} , мг/л) (одномерная модель) (x , км; t , сут)

q, D для одномерной пространственной модели. Рис. 4-5 и рис. 6-7 показывают изменение концентрации органического вещества и стойкой фракции в течении 14 суток. Из рисунков видно, что обе величины убывают с течением времени. Значение L_{org} падает до нуля на 4 суток.

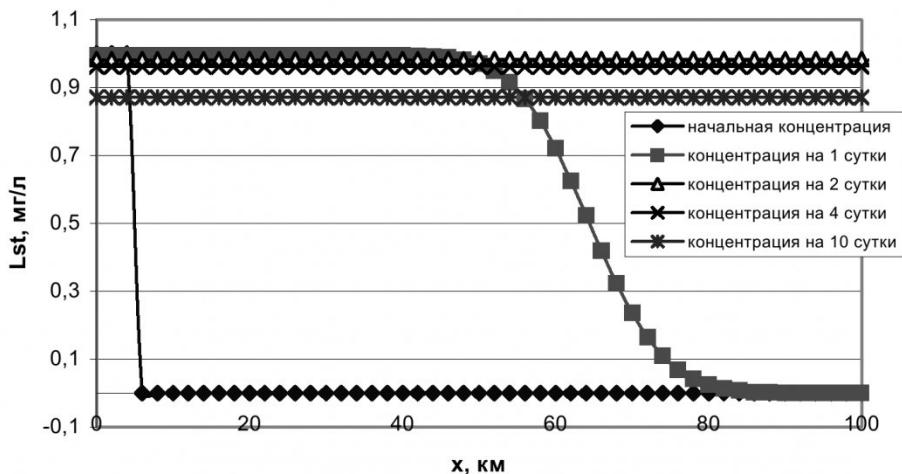


Рис. 7. Изменение концентрации стойкой фракции (одномерная модель)

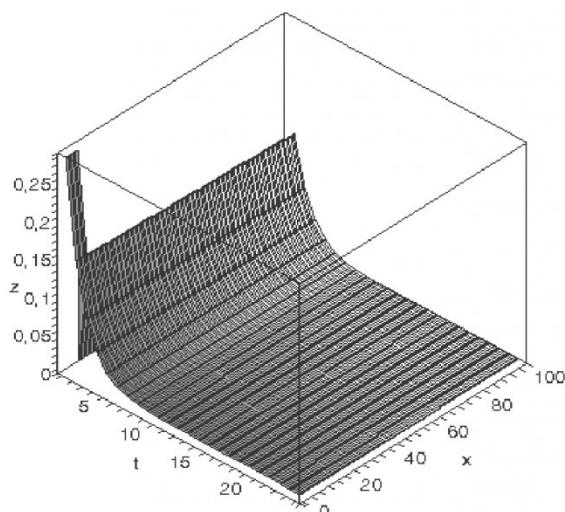


Рис. 8. Изменение концентрации органического вещества (L , мг/л) (одномерная модель) (x , км; t , сут)

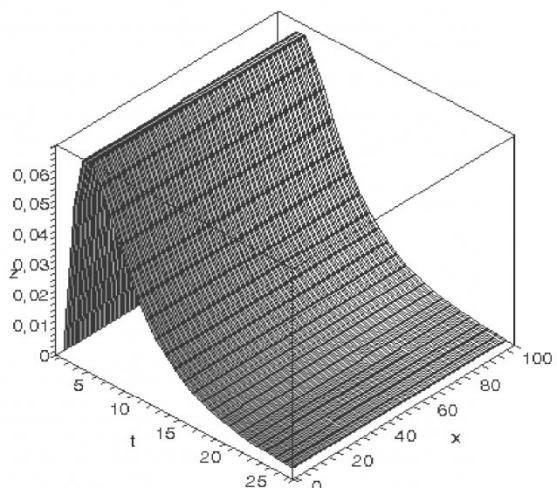


Рис. 10. Изменение дефицита кислорода (D , мг/л) (одномерная модель) (x , км; t , сут)

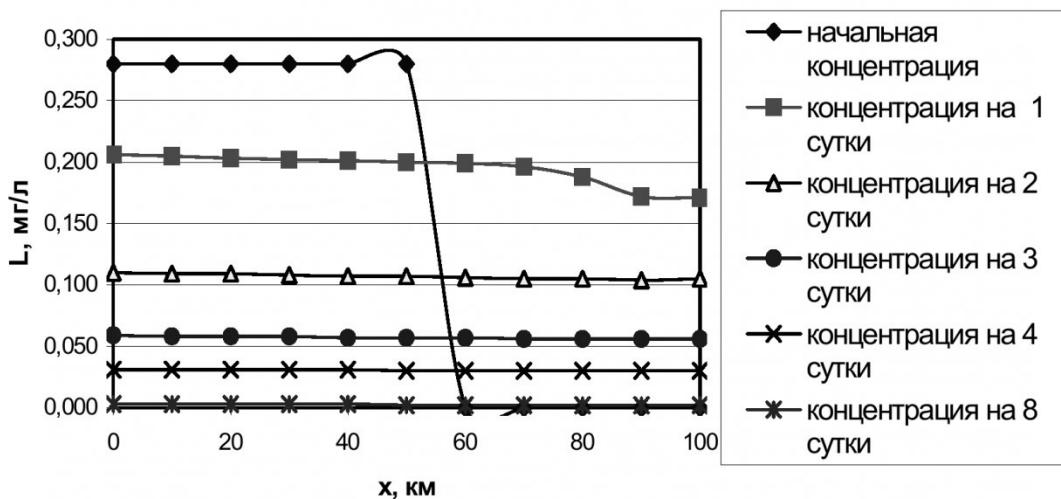


Рис. 9. Изменение концентрации органического вещества (одномерная модель)

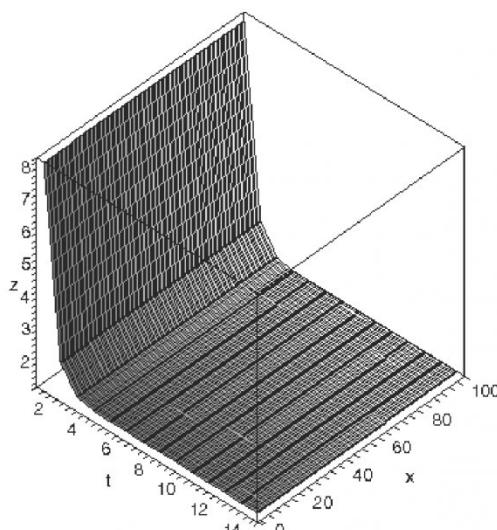


Рис. 11. Изменение растворенного в воде кислорода (q , мг/л) (одномерная модель) (x , км; t , сут)

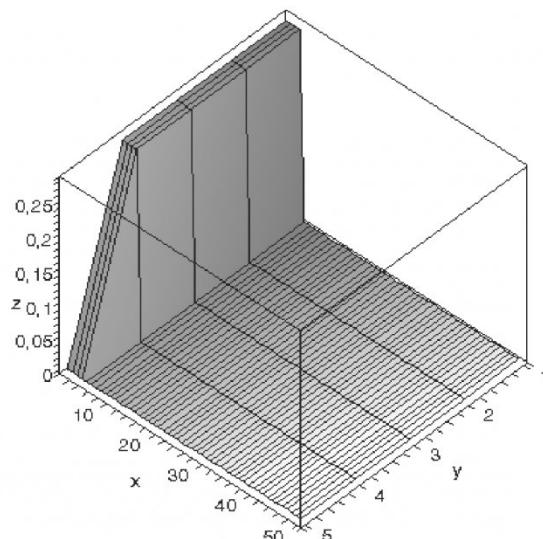


Рис.12. Распределение органического вещества (L_{org} , мг/л). Начальная концентрация (двумерная модель) (x , y , км)

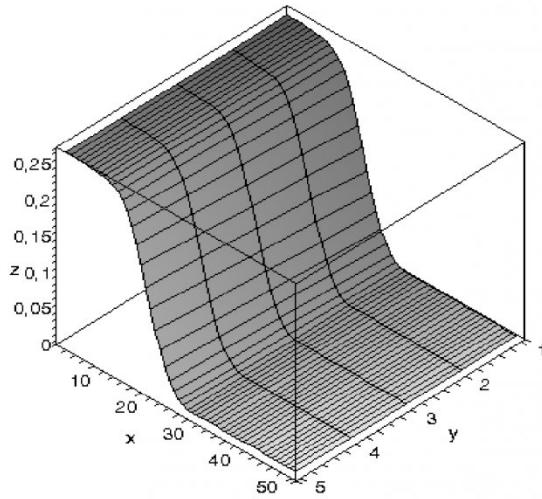


Рис.13. Распределение органического вещества (L_{org} , мг/л). Концентрация на первые сутки (двумерная модель) (x , y , км)

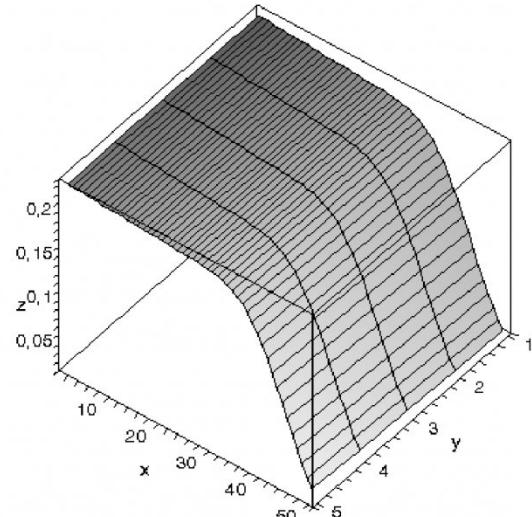


Рис.14. Распределение органического вещества (L_{org} , мг/л). Концентрация на вторые сутки (двумерная модель) (x , y , км)

тки, L_{st} с течением времени убывает медленно и к 10 суткам уменьшается до 0,88 мг/л.

На рис. 8-9 и 10 приведено изменение концентрации органического вещества (L) и дефицита кислорода (D) для одномерной пространственной модификации модели (1.1) в течении 30 суток. Качественно картина поведения L совпадает с поведением L_{org} для более сложной модели. Заметим только, что в модели Кемпа процесс самоочищения идет медленнее. Дефицит кислорода в первые сутки, когда концентрации органического вещества в реке достаточно велика, увеличивается, а затем начинает уменьшаться до нуля.

На рис. 12-14 приведены значения L_{org} в различные моменты времени для двумерной модели. Рассматривался прямоугольный участок

реки длиной 100 км и шириной 5 км. Скорость течения реки бралась равной 120 км/сут, а коэффициент диффузии $2,5 \text{ км}^2/\text{сут}$.

Усложненная модель создавалась для описания процесса самоочищения, когда концентрация органического вещества достаточно высока.

В данной работе рассматривалось $L_{org}=30$ мг/л и $L_{org}=0.28$ мг/л. Анализ полученных результатов показал, что усложненная модель одинаково хорошо работает как для больших, так и для малых концентраций загрязнения. При малых концентрациях органического вещества расчеты по моделям Кемпа и усложненной дают близкие результаты. При больших концентрациях органического вещества модель Кемпа дает результаты, не соответствующие действительности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Биологические процессы и самоочищение на загрязненном участке реки (на примере Верхнего Днепра). – Минск.: Изд-во БГУ, 1987.
2. Белолипецкий В.М., Шокин Ю.И. Математические модели в задачах охраны окружающей среды. – Новосибирск: Издательство «ИНФОЛИО - пресс», 1997.
3. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем.- М.: Наука,1971.
4. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. – М.: Эдиторал УРСС, 1999.
5. Вержбицкий В.М. Основы численных методов: Учебник для вузов. -М.:Высш. шк., 2002.
6. Экологический мониторинг. Состояние окружающей природной среды Томской области в 1998 году. – Томск, 1999.

□ Авторы статьи:

Михайлов
Михаил Дмитриевич
- ст. преп. каф. вычислительной
математики и компьютерного мо-
делирования Томского Государ-
ственного университета

Трапп
Виктория Викторовна
- дипломант каф. вычислительной
математики и компьютерного мо-
делирования Томского Государст-
венного университета

УДК 622.1:528 (043.2)

В. И. Снетков

КРИТЕРИЙ ОПТИМАЛЬНОСТИ ПРИ АППРОКСИМАЦИИ ГЕОЛОГИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ С ПОМОЩЬЮ РЯДОВ ФУРЬЕ

Для оценки тенденций в изменении геологического показателя по линии или в пространстве обычно применяют фильтрующие или аппроксимирующие процедуры, позволяющие уменьшить влияние случайной изменчивости. К ним относятся различного рода скользящие средние, полиномиальные функции, сплайны, гармонический анализ Фурье и другие [1-3, 5-7, 9]. Наибольшее распространение в геологии и горном деле получил метод Фурье, однако при его практическом применении существуют трудности, связанные с выбором числа гармоник, необходимых для правильного описания закономерного изменения изучаемого показателя.

Как известно, анализ Фурье применяется при исследовании временных процессов и представляет собой метод разложения сигнала или случайной функции на отдельные гармоники. В геологии и горном деле принято считать сигнал состоящим из трех частей: линейного *тренда*, различных *периодических* или циклических компонент и *случайной* компоненты. Тренд данных обнаруживается подбором соответствующей прямой регрессии. Считается, что тренд существует, если угол наклона прямой является значимым. Отметим, что дисперсионный анализ не всегда способен правильно решить эту задачу, и поэтому практика показала, что тренд необходимо всегда устранять вне зависимости от значимости коэффициентов регрессии. Устранение тренда обязательно для применения метода Фурье для того, чтобы осуществить преоб-

разование исходного временного ряда в последовательность отклонений от подобранный прямой линии. Оставшаяся часть временного ряда состоит из *сигнала* (периодической компоненты) и *шума* (случайной компоненты).

Итак, одной из основных задач анализа Фурье является выделение главной периодической компоненты, что эквивалентно выделению закономерного изменения показателя из композиции в случайному процессе.

Основные положения анализа Фурье и принципы его применения следующие. Любая периодическая функцию может быть разложена в так называемый ряд Фурье [2,3], который для простых последовательностей имеет вид:

$$Y_i = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\alpha_n \cos \frac{2n\pi x_i}{\lambda} + \beta_n \sin \frac{2n\pi x_i}{\lambda} \right),$$

где n – гармоническое число; α_n, β_n - коэффициенты гармоник; λ - длина волны основной гармоники.

В действительности, обычно величина λ неизвестна и в качестве основной длины волны выбирают произвольное значение L . Если выбрать L большим или равным длины изучаемого ряда данных и вычислить достаточное число гармоник, то получим оценку периодичности, присутствующей в наших данных. Произвольный выбор значения L скорее всего будет неправильной