

**Tadeusz Kwater, Bogdan
Kwiatkowski, Paweł Krutys, Ewa
Żesławska**

**Symulacje komputerowe modelu
matematycznego zanieczyszczonej
biochemicznie wody z
uwzględnieniem zjawiska dyfuzji**

Edukacja - Technika - Informatyka 4/2, 345-350

2013

Artykuł został opracowany do udostępnienia w internecie przez Muzeum Historii Polski w ramach prac podejmowanych na rzecz zapewnienia otwartego, powszechnego i trwałego dostępu do polskiego dorobku naukowego i kulturalnego. Artykuł jest umieszczony w kolekcji cyfrowej bazhum.muzhp.pl, gromadzącej zawartość polskich czasopism humanistycznych i społecznych.

Tekst jest udostępniony do wykorzystania w ramach
dozwolonego użytku.

**Tadeusz KWATER, Bogdan KWIATKOWSKI, Paweł KRUTYS,
Ewa ŻEŚLAWSKA**
Uniwersytet Rzeszowski, Polska

Symulacje komputerowe modelu matematycznego zanieczyszczonej biochemicznie wody z uwzględnieniem zjawiska dyfuzji

Wstęp

Zastosowanie modelowania matematycznego systematycznie wzrasta ze względu na dostępność sprzętu obliczeniowego wysokiej jakości oraz korzyści wynikające z jego rezultatów. Powoduje to, że dokładność rozwiązań uwzględnia coraz to więcej szczegółów w opisie zjawisk. W konsekwencji uzyskuje się bardziej złożone opisy matematyczne zjawisk. W artykule zaproponowano model matematyczny zanieczyszczeń biochemicznych wody z uwzględnieniem zjawiska dyfuzji dla wielowymiarowej przestrzeni.

1. Model matematyczny zanieczyszczonej biochemicznie wody

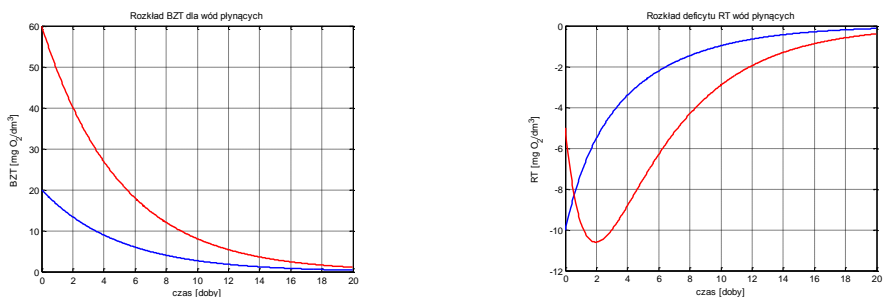
Do rozważań przyjęto następujące wskaźniki zanieczyszczeń wody, tj.: **Biochemiczne Zapotrzebowanie Tlenu (BZT)** oraz poziom **Rozpuszczony Tlen (RT)**. Zgodnie z równaniem różniczkowym kinetyki reakcji fizyczno-chemicznej pierwszego rzędu rozkłady BZT i RT przyjmują postać [Szymkiewicz 2000; Palczewski 2004]:

$$\frac{d}{dt}x_1(t) = -k_1x_1(t) \quad (1)$$

$$\frac{d}{dt}x_2(t) = -k_2x_1(t) - k_3x_2(t) + a, \quad (2)$$

w których: $x_1[mg/l]$ – stężenie zanieczyszczeń organicznych (BZT), $x_2[mg/l]$ – deficyt RT, $t[do\text{ba}]$ – czas, $k_1[do\text{ba}^{-1}]$ – współczynnik szybkości reakcji, $k_2[do\text{ba}^{-1}]$ – współczynnik szybkości wpływu BZT na RT, $k_3[do\text{ba}^{-1}]$ – współczynnik szybkości pobierania tlenu z atmosfery, $a[mg/l]$ – intensywność pobierania/dostarczania tlenu.

Rezultaty badań symulacyjnych dla równań (1) i (2) przedstawiono na rys. 1.



Rys. 1. Zmiana BZT i RT w rzece przy różnych warunkach początkowych

Zgodnie z oczekiwanymi wynikami widać (zob. rys. 1), że natura opisywanych zjawisk (określana przez BZT i RT) wykazuje zdolność do samooczyszczania. Wartości zanieczyszczeń zmniejszają się w miarę upływu czasu.

2. Modelowanie matematyczne dyfuzji w zbiornikach wodnych

Zjawisko dyfuzji jest ważnym czynnikiem wpływającym na stan jakości wody. Dyfuzja to ruch substancji powodujący przemieszczanie się cząsteczek substancji z obszarów o większym stężeniu (gęstości) do obszarów o mniejszym stężeniu. Rozważania prowadzone są na przestrzeni określonej długością, szerokością oraz głębokością. Na podstawie twierdzenia Gaussa-Ostrogradskiego dyfuzję można przedstawić w postaci ogólnej [Szymkiewicz, Gąsiorowski 2010]:

$$\frac{\partial x}{\partial t} - \text{div}(D \text{grad } x) + \delta = 0 \quad (3)$$

gdzie: x – wektor reprezentujący zanieczyszczenia, D – współczynnik dyfuzji, δ – intensywność wytwarzania lub zanik przenoszonego czynnika.

Rozważając wektor stanu, który zależy od czasu, długości oraz dodatkowo od szerokości i głębokości, równanie (3) jest następujące:

$$\frac{\partial x}{\partial t} - \left(D \frac{\partial^2 x}{\partial z_1^2} + D \frac{\partial^2 x}{\partial z_2^2} + D \frac{\partial^2 x}{\partial z_3^2} \right) + Ax + \delta = 0, \quad (4)$$

gdzie: z_1, z_2, z_3 – współrzędne przestrzenne odpowiednio dla długości, szerokości i głębokości.

Zakładając, że zmiana dyfuzji wzdłuż zmiennej przestrzennej głębokości wody jest pomijalnie mała w stosunku do szerokości i długości akwenu wodnego, w równaniu (4) ostatni składnik w nawiasie znika. Natomiast uwzględniając prędkość przepływu, pojawi się dodatkowy parametr [Żesławska 2011]:

$$\frac{\partial x}{\partial t} - \left(D \frac{\partial^2 x}{\partial z_1^2} + D \frac{\partial^2 x}{\partial z_2^2} \right) + V \frac{\partial x}{\partial z_1} + Ax + \delta = 0, \quad (5)$$

gdzie: $V = \begin{bmatrix} v & 0 \\ 0 & v \end{bmatrix}$ – diagonalna macierz reprezentująca prędkość przepływu,

$A = \begin{bmatrix} -k_1 & 0 \\ -k_2 & -k_3 \end{bmatrix}$ – macierz stanu, w której współczynniki $k_i = 1,2,3$ określają

szybkości reakcji BZT i RT.

Dalsze uproszczenia modelu z dyfuzją można uzyskać, przyjmując rozwiązania dla bardzo długiej i „wąskiej” oraz „płytkiej” rzeki. Wówczas równanie (5) przyjmuje następującą postać:

$$\frac{\partial x}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial x}{\partial z} \right) + Ax + \delta = 0 \quad (6)$$

W niniejszym artykule badania symulacyjne przeprowadzono dla równania (6), którego rozwiązanie możliwe jest przy znanych warunkach granicznych (warunki brzegowe i początkowe), które przyjmują postać:

$$x(z_1, t_0) = f_{p1}(z_1) \quad (7a)$$

$$x(z_2, t_0) = f_{p2}(z_2) \quad (7b)$$

$$x(0, t) = f_b(t), \quad (7c)$$

przy czym funkcje f_{p1}, f_{p2}, f_b są znane.

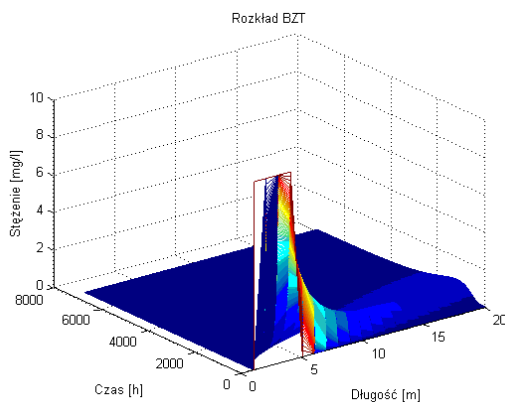
Do rozwiązania zagadnienia określonego zależnościami (6) i (7a), (7b), (7c) wykorzystano metodę różnic skończonych. Zapewnienie stabilności wymaga przyjęcia odpowiedniego kroku dyskretyzacji, który zapewni stabilność w obszarze rozwiązań, a także należy uwzględnić regułę dyfuzyjnej liczby Couranta [Kwater, Krutys, Bartman, Pękala *Simulation...*]:

$$dt \leq \frac{dz^2}{2D} \quad (8)$$

gdzie: D – wskaźnik dyfuzji, dt, dz – odległość między węzłami.

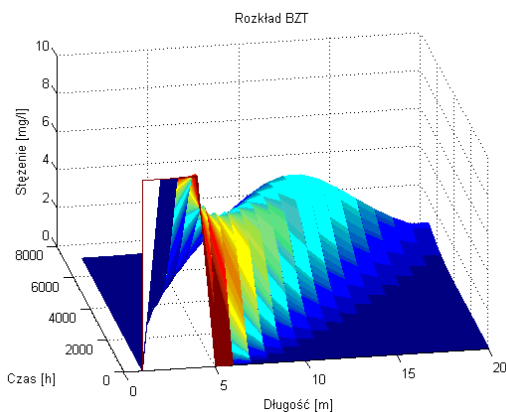
3. Rezultaty eksperymentów numerycznych

Przeprowadzono szereg badań symulacyjnych dla przypadku uwzględniającego długość oraz czas. Badano obiekt opisany równaniem (6) dla różnych wartości prędkości rzeki oraz współczynnika samooczyszczania. W wyniku rozwiązań otrzymano hiperpowierzchnię przedstawioną na rys. 2, dla przypadku gdy pojawiło się zanieczyszczenie (BZT) w chwili początkowej na początku długości. W miarę upływu czasu i długości stężenie maleje, jednak „widać” przeniesienie zanieczyszczeń spowodowane prędkością przepływu V w modelu matematycznym.



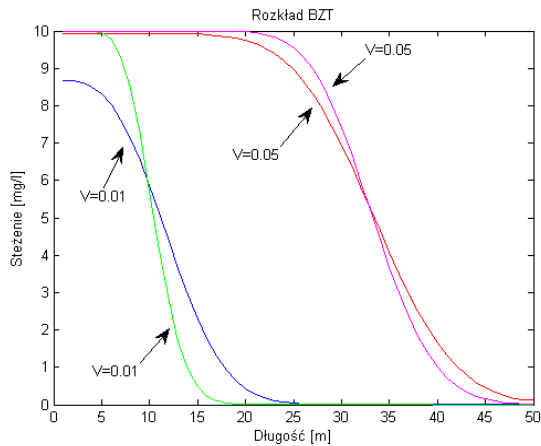
Rys. 2. Rozkład BZT z dyfuzją i procesem samooczyszczania

Istotny wpływ na rozkład zanieczyszczeń z uwzględnieniem dyfuzji ma dodatkowo proces samooczyszczania oraz prędkości przepływu wody w rzece. Większa prędkość rzeki powoduje, że pojawiające się zanieczyszczenia „porywane” są przez uwzględnienie zjawiska transportu (przepływ), a ich szerokość rozkładu zależy od wartości prędkości. Kierunek rozkładów na hiperpowierzchni związany jest z prędkością przepływu i dla mniejszej prędkości „zasięg grzbietu” jest większy (rys. 3).



Rys. 3. Rozkład BZT bez procesu samooczyszczania przy dużej prędkości rzeki

Na podstawie przeprowadzonych eksperymentów symulacyjnych zaobserwowano istotny wpływ prędkości na rozkład zanieczyszczeń. Wartości BZT przy większych prędkościach rzeki z uwzględnieniem dyfuzji przyjmują zbliżone wartości (patrz krzywa czerwona i purpurowa na rys. 4).



Rys. 4. Rozkład BZT przy różnych prędkościach z dyfuzją i bez dyfuzji

Rezultat ten otrzymano dokonując przekroju hiperpowierzchni z rys. 3 dla wybranej chwili czasowej. Natomiast przy mniejszych prędkościach przepływu wody otrzymano zróżnicowane wartości rozkładów zanieczyszczeń (krzywa zielona i niebieska na rys. 4.).

Przy większych prędkościach dyfuzja ma mniejszy wpływ na rozkład zanieczyszczeń, aniżeli przy małych prędkościach, gdzie należy uwzględnić zjawisko dyfuzji.

Podsumowanie

W artykule zaproponowano modele matematyczne biochemicznie zanieczyszczonej wody dla różnego stopnia złożoności, m.in. z uwzględnieniem zjawiska dyfuzji. W eksperymentach symulacyjnych analizowano zjawiska zachodzące względem współrzędnych przestrzennych i czasu. W rezultacie przeprowadzonych eksperymentów symulacyjnych można stwierdzić, że przy dużych prędkościach rzeki zjawisko dyfuzji można pominąć. Natomiast przy małych prędkościach dyfuzja ma istotny wpływ i zaleca się jej uwzględnienie.

Literatura

- Kwater T., Krutys P., Bartman J., Pękala R., *Simulation of diffusion experiments in environment water polluted*, 8-th AIMS International Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, Dresden University of Technology, Department of Mathematics, p. 307.
- Palczewski A. (2004), *Równania różniczkowe zwyczajne, teoria i metody numeryczne z wykorzystaniem komputerowego systemu obliczeń symbolicznych*, Warszawa.
- Szymkiewicz R. (2000), *Modelowanie matematyczne przepływów w rzekach i kanałach*, Warszawa.

Szymkiewicz R., Gąsiorowski D. (2010), *Podstawy hydrologii dynamicznej*, Warszawa.
Żesławska E. (2011), *Badania symulacyjne modeli matematycznych biochemicznie zanieczyszczonej wody z uwzględnieniem zjawiska dyfuzji*. Praca magisterska, Uniwersytet Rzeszowski.

Streszczenie

W artykule przedstawiono eksperymenty badań modeli matematycznych zanieczyszczonej biochemicznie wody dla różnych stopni złożoności. Jakość wody reprezentowana jest przez następujące wskaźniki: Biochemiczne Zapotrzebowanie na Tlen oraz Rozpuszczony Tlen. Badania symulacyjne przeprowadzono dla modelu matematycznego w postaci równań różniczkowych cząstkowych II rzędu, w których uwzględniono zjawisko dyfuzji, a także prędkości przepływu.

Słowa kluczowe: modelowanie matematyczne, równania różniczkowe cząstkowe, dyfuzja, eksperymenty symulacyjne.

Computer simulations of mathematical biochemically polluted water model including the phenomenon of diffusion

Abstract

This paper presents experimental study of mathematical models of biochemical polluted water for different degrees of complexity. Water quality is represented by the following indicators: Biochemical Oxygen Demand and Dissolved Oxygen. Simulation studies were performed for a mathematical model of in the form of partial differential equations II-th order, which takes into account the phenomenon of diffusion, and flow velocity.

Key words: mathematical modeling, partial differential equations, diffusion, simulation experiments.